ランダウ=リフシッツ理論物理学教程

量子力学

=非相対論的理論=

改訂増補第3版

2

レフ・ダビドヴィチ・ランダウ
エフゲニイ・ミハイロヴィチ・リフシッツ 著
レフ・ペトロヴィチ・ピタエフスキー 改訂増補協力

好村滋洋
井上健男 訳

[改訂新版]

東京図書株式会社

Лев Давыдович Ландау
Евгеиий Михайлович Лифшиц
КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА
нерелятивистская теория
издание 3–е
переработанное и дополненное
при участии Л. П. Питаевского

第2巻の目次

第17章　弾性衝突

第18章　非弾性衝突の理論

第1巻の目次

記　号　例

演算子は山印の記号によってあらわされる：$\hat{f}$

体積要素：座標空間 dV，配置空間 dq，運動量空間 d^3p

物理量 f の行列要素（第1巻37頁の定義参照）f_{nm} または $\langle n|f|m\rangle$

遷移振動数 $\omega_{nm}=(E_n-E_m)/\hbar$

2個の演算子の交換子 $\{\hat{f},\hat{g}\}=\hat{f}\hat{g}-\hat{g}\hat{f}$

ハミルトニアン　$\hat{H}$

波動関数の位相のずれ　δ_l

原子単位およびクーロン単位については第1巻139頁の定義を見よ．

ベクトルおよびテンソルの添字はラテン文字 i, k, l を用いてあらわす．

反対称単位テンソル e_{ikl}（第1巻99頁の定義）

本教程の他の巻や節や公式の番号の引用にはローマ数字を用いる：

Ⅰ —— 第1巻『力学』1973年

Ⅱ —— 第2巻『場の古典論』1973年

Ⅳ —— 第4巻『相対論的量子力学』1968年

第11章　2原子分子

§ 78.　2原子分子の電子項

分子理論では，電子の質量に比べて原子核の質量がひじょうに大きいという事実が重要な役割を果たしている．質量がこのように異なるため，分子内の核の運動速度は電子速度に比べて小さい．このため，互いに一定の距離だけへだたった静止核のまわりの電子運動を考えることが可能になる．このような系のエネルギー準位 U_n が決定すれば，つまり分子のいわゆる**電子項**を見いだしたことになる．原子ではエネルギー準位が一定の数値であらわされたのに反し，分子では電子項は数値でなく，分子内核間距離というパラメーターの関数である．エネルギー U_n には核と核との間の静電相互作用のエネルギーも含まれるため，U_n は必然的に静止核の一定の配置に対する分子の全エネルギーをあらわすことになる．

われわれは**2原子分子**というもっとも簡単な型の分子の研究から始めよう．2原子分子についてはもっとも完全な理論的研究がなされている．2原子分子の電子項は，核間距離 r というただ一つのパラメーターの関数である．

原子項の分類の基本原理の一つは，全軌道角運動量 L の値によって分類することである．ところが分子では，数個の核のつくる電場は中心対称をもたないため，全軌道角運動量の保存則は一般には成り立たない．

しかしながら2原子分子では，電場は二つの核を貫く軸のまわりの軸対称をもっている．このためこの軸への軌道角運動量の投影はここでは保存され，したがってわれわれはこの投影の値によって分子の電子項を分類することができる．分子軸への軌道角運動量の投影の絶対値は記号 Λ であらわされ，これは $0, 1, 2, \cdots$ などの値をとる．異なる Λ の値をもつ項はギリシア語の大文字であらわされ，これは異なる L をもつ原子項のラテン語の記号に対応している．したがって，$\Lambda=0, 1, 2$ はそれぞれ Σ-, Π-, Δ- 項と呼ばれる．これ以上大きい Λ

はふつう考察されない.

さらに分子の各電子状態は分子内のすべての電子の全スピン S によって区別される. ゼロでない S に対しては, 全スピンの方向に関する $(2S+1)$ 重の縮退[1]が存在する. 量子数 $2S+1$ は, 原子の場合と同様に項の**多重度**と呼ばれ, 項の記号の添字の形に書かれる. たとえば $^3\Pi$ は $\Lambda=1$, $S=1$ の項をあらわす.

軸のまわりの任意の角だけの回転とならんで, 分子の対称性はこの軸を含む任意の平面での鏡映をも可能にする. このような鏡映を行なったとしても, 分子のエネルギーが変化しないことは明らかである. ところがその結果得られる状態は, 最初の状態とまったく同一ではない. すなわち, 分子軸を含む面での鏡映を行なうと, この軸のまわりの角運動量 (軸性ベクトル!) の符号は変化するからである. したがって Λ の値がゼロでないすべての電子項は2重に縮退している——つまりエネルギーの各値に対して, 分子軸への軌道角運動量の投影の向きが異なる二つの状態が対応するという結果に到達する. これに対して $\Lambda=0$ の場合には, 鏡映によって分子の状態はまったく変わらないので, Σ-項は縮退しない. Σ-項の波動関数は鏡映の結果として定数因子が掛けられるだけである. 同一平面での2回の鏡映は恒等変換に帰着されるので, この定数は ±1 に等しい. したがって, 鏡映によって波動関数がまったく変わらない Σ-項と波動関数の符号が変化する Σ-項とを区別しなければならない. 前者は Σ^+ であらわされ, 後者は Σ^- であらわされる.

もしも分子が二つの同種原子からなる場合には, 新しい対称性があらわれ, それに伴って電子項に付加的な性質があらわれる. すなわち同種核からなる2原子分子は, 核を結ぶ線を2等分する点に関する対称中心を新たにもつ (この点を座標原点に選ぶことにしよう)[2]. したがってハミルトニアンは (核の座標を固定したまま), 分子内の全電子の座標の符号を同時に変えることに対して不変である. このような変換の演算子[3]は軌道角運動量の演算子とも可換であるので, Λ の確定した値をもつ項をさらに偶奇性に関して分類する可能性が得

1) 相対論的相互作用に基づく微細構造をここでは無視する (§83, §84以下参照).

2) このような2原子分子は, 分子軸に垂直で軸を2等分する対称面をももっている. しかしながらこのような対称性をとくに研究する必要はない. そのわけはこのような対称面の存在は対称中心と対称軸とが存在する事実から自動的に導かれるからである.

3) この変換を系の全粒子の座標を反転する変換と混同してはならない (§86と比較せよ)!

られる．つまり**偶状態**（g）の波動関数は電子座標の符号の変化によって変わらず，**奇状態**（u）の波動関数は符号を変える．偶奇性をあらわす指数 u, g は項の記号の下に書かれ，たとえば Π_u, Π_g などとなる．

次のことが経験的に知られている．化学的に安定な2原子分子の圧倒的多数の基底電子状態は完全な対称性をもつ．つまり電子の波動関数は分子の対称性のあらゆる変換に関して不変である．圧倒的多数の基底状態の場合において，全スピン S もまたゼロとなる．いいかえると，分子の基底項は ${}^1\Sigma^+$ であり，またもし分子が同種原子からなる場合には ${}^1\Sigma_g^+$ である．これらの規則のよく知られた例外は分子 O_2（基底項 ${}^3\Sigma_g^-$）および NO（基底項 ${}^2\Pi$）である．

問　題

楕円座標を用いて，H_2^+ イオンの電子項に対するシュレーディンガー方程式中の変数分離を行なえ．

解　二つの静止した陽子の場における電子のシュレーディンガー方程式は（原子単位を用いて）

$$\triangle\psi+2\left(E+\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)\psi=0$$

となる．楕円座標 ξ, η は

$$\xi=\frac{r_1+r_2}{R},\quad \eta=\frac{r_2-r_1}{R}\quad (1\leqq\xi\leqq\infty,\ -1\leqq\eta\leqq1)$$

と定義され，第3の座標 φ は，互いに距離 R の位置にある二つの核を結ぶ軸のまわりの回転角である（第I巻『力学』§48参照）．これらの座標におけるラプラス演算子は

$$\triangle=\frac{4}{R^2(\xi^2-\eta^2)}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}(\xi^2-1)\frac{\partial}{\partial\xi}+\frac{\partial}{\partial\eta}(1-\eta^2)\frac{\partial}{\partial\eta}\right]+\frac{1}{R^2(\xi^2-1)(1-\eta^2)}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

である．

$$\psi=X(\xi)Y(\eta)e^{i\Lambda\varphi}$$

と置くと，X および Y に対する次の方程式を得る：

$$\frac{d}{d\xi}\left[(\xi^2-1)\frac{dX}{d\xi}\right]+\left(\frac{ER^2}{2}\xi^2+2R\xi+A-\frac{\Lambda^2}{\xi^2-1}\right)X=0,$$

$$\frac{d}{d\eta}\left[(1-\eta^2)\frac{dY}{d\eta}\right]+\left(-\frac{ER^2}{2}\eta^2-A-\frac{\Lambda^2}{1-\eta^2}\right)Y=0.$$

ここで A は分離パラメーターである．各電子項 $E(R)$ は三つの量子数，すなわち，Λ および関数 $X(\xi)$ と $Y(\eta)$ のゼロ点の数を決める二つの《楕円量子数》n_ξ, n_η によって特徴づけられる．

§ 79. 電子項の交差

一つのパラメーターすなわち核間距離 r の関数である2原子分子の電子項は，r の関数としてエネルギーをプロットしてグラフであらわすことができる．異なる電子項をあらわす曲線が交差する問題はひじょうに重要である．

$U_1(r), U_2(r)$ を二つの異なる電子項としよう．もしもそれらがある点で交差すると，この点の近傍で関数 U_1, U_2 は近い値をとるであろう．このような交差が可能かどうかを決めるためには，問題を次の形に設定すると便利である．

関数 $U_1(r)$ と $U_2(r)$ とがひじょうに近いが同一でない値（それらを E_1, E_2 と名づけよう）をとる点 r_0 を考え，その点を小さい値 δr だけ移動して U_1 と U_2 が同じ値をとることができるかを考察しよう．エネルギー E_1 と E_2 は，互いに距離 r_0 だけ離れた核の場にある電子系のハミルトニアン $\hat{H}_0$ の固有値である．もしも距離 r に増加分 δr を加えると，ハミルトニアンは $\hat{H}_0+\hat{V}$ となる．ここで $\hat{V}=\delta r\dfrac{\partial\hat{H}_0}{\partial r}$ は小さい補正である．点 $r_0+\delta r$ における関数 U_1, U_2 の値は新しいハミルトニアンの固有値とみなすことができる．このような観点は，点 $r_0+\delta r$ における項 $U_1(r), U_2(r)$ の値を摂動論の方法で決定することを可能にする．ここで $\hat{V}$ は演算子 $\hat{H}_0$ に対する摂動とみなされる．

しかしながら，摂動論の一般的方法はここで適用できない．そのわけは，非摂動状態のエネルギー固有値 E_1, E_2 は互いにひじょうに接近しており，両者の差は，一般的にいって摂動の値に比べて大きくないからである（条件 (38.9) は満たされない）．差 E_2-E_1 がゼロになる極限では，固有値が縮退した場合を扱うことになるので，§39で展開されたのと同様の方法を，接近した固有値の場合に適用してみるのが自然である．

エネルギー E_1, E_2 に対応する非摂動演算子 $\hat{H}_0$ の固有関数を ψ_1, ψ_2 としよう．出発点のゼロ次近似として，ψ_1 および ψ_2 自身のかわりに

$$\psi=c_1\psi_1+c_2\psi_2 \tag{79.1}$$

の形をした両者の線形結合をとろう．この式を摂動方程式

$$(\hat{H}_0+\hat{V})\psi=E\psi \tag{79.2}$$

に代入すると，

$$c_1(E_1+\hat{V}-E)\psi_1+c_2(E_2+\hat{V}-E)\psi_2=0$$

を得る．この式の左から ψ_1^* と ψ_2^* を別々に掛けて積分すれば，次の二つの代

数方程式を得る：

$$c_1(E_1+V_{11}-E)+c_2V_{12}=0,$$
$$c_1V_{21}+c_2(E_2+V_{22}-E)=0. \tag{79.3}$$

演算子 $\hat{V}$ のエルミート性のために，V_{11} と V_{22} の値は実であり，$V_{12}=V_{21}^*$ である．これらの方程式の連立条件は

$$\begin{vmatrix} E_1+V_{11}-E & V_{12} \\ V_{21} & E_2+V_{22}-E \end{vmatrix}=0$$

である．これから

$$E=\frac{1}{2}(E_1+E_2+V_{11}+V_{22})\pm\sqrt{\frac{1}{4}(E_1-E_2+V_{11}-V_{22})^2+|V_{12}|^2} \tag{79.4}$$

が得られる．この式によって，1次近似における求めているエネルギー固有値が決定される．

もしも二つの項のエネルギー値が点 $r_0+\delta r$ で等しくなる（つまり項が交差する）ならば，このことは式 (79.4) で決められる二つの値 E が一致することを意味する．これが実現されるためには，(79.4) における根号の中がゼロとなる必要がある．それは二つの絶対値の自乗の和であるので，項が交差する点が存在するための条件として，方程式

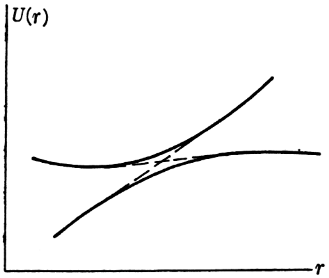
$$E_1-E_2+V_{11}-V_{22}=0, \qquad V_{12}=0 \tag{79.5}$$

が得られる．しかしながら，勝手に選ぶことができるのは摂動 $\hat{V}$ を決定するただ一つの任意のパラメーター，すなわち変位 δr の値だけである．このため，(79.5) の二つの方程式は一般的にいって同時に満たされない（関数 ψ_1, ψ_2 は実に選んであるので，V_{12} もまた実であると考えている）．

しかしながら行列要素 V_{12} が恒等的にゼロになることが起こり得る．その場合には方程式 (79.5) のうちのただ一つが残り，これは δr を適当に選ぶことによって満足することができる．このことは，考えている二つの項が異なる対称性をもつ場合にはいつも起こる．ここで対称性といったのは，あらゆる可能な対称性の形——つまり軸のまわりの回転，平面での鏡映，反転ならびに電子の互換に関する対称性をさしている．2原子分子においてはこのことは，異なる Λ，異なる偶奇性または異なる多重度をもつ項をさしており，とくに Σ-項に対しては Σ^+ と Σ^- をもつ項をさしている．

上に述べたことの正当性は，演算子 $\hat{V}$ が（ハミルトニアンそれ自身と同様に）分子のすべての対称演算子——軸のまわりの角運動量演算子，鏡映および反転演算子，電子の置換演算子と可換であることによっている．§29, §30 で示したように，その演算子が角運動量および反転演算子と可換なスカラー量に対しては，ゼロでない行列要素は同じ角運動量と偶奇性をもつ状態間の遷移に対してのみ存在する．この証明は任意の対称演算子の一般的な場合においても本質的に同じ形で成り立つ．ここではそれをくり返すのは避けて，§97 で群論に基づいたより一般的な証明を与えることにする．

したがって次の結論に達する．すなわち2原子分子においては異なる対称性の項のみが交差することができて，同じ対称性の項の交差は不可能である（E. Wigner, J. von Neumann, 1929）．もしもある近似計算の結果として同じ対称性をもつ交差する二つの項を得たならば，次の近似の計算を行なえば，第27図の実線で示すように二つの項は分離することがわかるであろう．



第 27 図

この結論は2原子分子に対して成り立つのみならず，実は量子力学の一般的な定理でもあることを強調しておく．ハミルトニアンがあるパラメーターを含み，その結果としてその固有値はこのパラメーターの関数であるような任意の場合に，この定理はあてはまる．

群論の言葉を用いると（§96 参照），項の交差の可能性を決定する一般的な要求は，系のハミルトニアンの対称性の群の異なる既約表現に項が属していることである[1]．

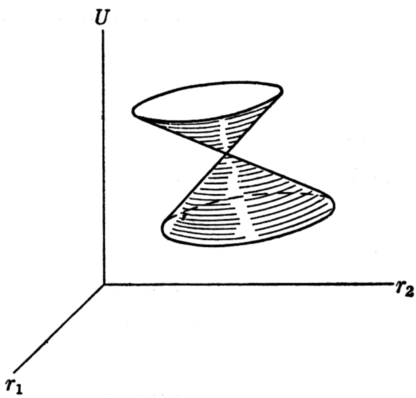
1）この規則に対する見かけ上の例外は，H_2^+ イオンの電子項についてである．これらの項は，角運動量の投影 Λ および楕円量子数 n_ξ, n_η によって特徴づけられる（§78 の問題を見よ）．これらの数はすべて異なる変数の関数に関連しているので，一般的に言って，同じ Λ に対して対 n_ξ, n_η の値が異なる項 $E(R)$——これらの項は回転と鏡影に関して同じ対称性を持っているにもかかわらず——の交差をさまたげるような理由はない．しかしながら実際には，与えられた系のシュレーディンガー方程式における変数の分離の事実は，そのハミルトニアンが系の幾何学的性質から導かれるより以上の高い対称性を持つことを意味している．この群全体に関して，数 n_ξ, n_η の値の異なる状態の対称性は，異なる型に属している．

多原子分子では電子項は一つではなくいくつかのパラメーター――異なる核の間の距離――の関数である．

核の間の独立な距離の数を s としよう．N 原子分子 ($N>2$) では核の勝手な配置に対してこの数は $s=3N-6$ となる．各項 $U_n(r_1, \cdots, r_s)$ は，幾何学的観点からみれば ($s+1$) 次元空間の中の表面をあらわしており，ゼロ（つまり点における交差）から $s-1$ までの異なる次元数の多次元体でのこれらの表面の交差を考えることができる．

上に示した導き方は，摂動 V が，ここでは二つではなく s 個のパラメーター――変位 $\delta r_1, \cdots, \delta r_s$――によって決定されるということだけを除けば，完全に成り立つ．パラメーターが二つある場合でも，(79.5) の二つの方程式が，一般的にいって満たされることができる．したがって多原子分子では，あらゆる二つの項は互いに交差することができるという結果に到達する．もしも項が同じ対称性をもつならば，交差は二つの条件 (79.5) によって決定され，このことから交差の起こる多次元体の次数は $s-2$ となる．もしも項が異なる対称性をもつならば，ただ一つの条件が残り，交差は ($s-1$) 次元の多次元体で起こることになる．

したがって $s=2$ では項は3次元座標系における表面であらわされる．これらの表面の交差は，項の対称性が異なるときは線 ($s-1=1$) で，同じ対称性のときは点 ($s-2=0$) で起こる．後者の場合，交差点の近傍の表面がいかなる形をもつかを調べるのは容易である．項の交差点の近傍におけるエネルギー値は式 (79.4) で決められる．この式で行列要素 V_{11}, V_{22}, V_{12} は変位 $\delta r_1, \delta r_2$ の1次関数であり，したがってまた距離 r_1, r_2 自身の1次関数でもある．ところでこのような方程式は，解析幾何学で知られているように，楕円錐を決定している．したがって交差点の近傍では，項は任意に配置された2葉の楕



第 28 図

円錐の表面によってあらわされる（第28図）．

§ 80. 分子項と原子項との関係

2原子分子の核間距離を増大させると，極限において二つの隔離された原子（またはイオン）を得る．このことに関連して，各原子を分離して得られる原子の状態と分子の電子項との間の対応についての問題が発生する（E. Wigner, E. Witmer, 1928）．この対応関係は一対一ではない．つまり，もしも確定した状態にある2原子を近づけると，いろいろな電子状態にある分子を得る．

最初に分子は二つの異なる原子からなると仮定しよう．隔離された原子が軌道角運動量 L_1, L_2 およびスピン S_1, S_2 をもつ状態にあるとし，また $L_1 \geqq L_2$ としよう．核を結ぶ直線への角運動量の投影は値 $M_1 = -L_1,\ -L_1+1, \cdots, L_1$ および $M_2 = -L_2,\ -L_2+1, \cdots, L_2$ をとる．和 M_1+M_2 の絶対値は2原子を近づけて得られる角運動量 Λ を決定する．M_1 と M_2 のあらゆる可能な値を組み合わせると，いろいろな値 $\Lambda = |M_1+M_2|$ が次のような回数だけ得られることがわかる：

$$
\begin{array}{ll}
\Lambda = L_1+L_2 & 2\text{回} \\
\quad L_1+L_2-1 & 4\text{回} \\
\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots & \\
\quad L_1-L_2 & 2(2L_2+1)\text{回} \\
\quad L_1-L_2-1 & 2(2L_2+1)\text{回} \\
\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots & \\
\quad 1 & 2(2L_2+1)\text{回} \\
\quad 0 & 2L_2+1\ \text{回}.
\end{array}
$$

$\Lambda \neq 0$ をもつすべての項は2重に縮退しており，$\Lambda = 0$ をもつ項は縮退していないことを思い出せば，次の諸項が得られる：

$$
\begin{array}{lll}
\Lambda = L_1+L_2 & \text{をもつ} & 1\ \text{項} \\
\Lambda = L_1+L_2-1 & \text{をもつ} & 2\ \text{項} \\
\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots & & \\
\Lambda = L_1-L_2 & \text{をもつ} & 2L_2+1\ \text{項} \\
\Lambda = L_1-L_2-1 & \text{をもつ} & 2L_2+1\ \text{項} \\
\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots & & \\
\Lambda = 0 & \text{をもつ} & 2L_2+1\ \text{項}.
\end{array}
\tag{80.1}
$$

0 から L_1+L_2 までの Λ の値をもつ項が全部で $(2L_2+1)(L_1+1)$ 個ある.

両原子のスピン S_1, S_2 は，角運動量合成の一般則に従って合成されて分子の全スピンをつくり，次のような可能な S の値を与える：

$$S=S_1+S_2,\ \ S_1+S_2-1, \cdots, |S_1-S_2|. \tag{80.2}$$

これらの値のおのおのを (80.1) の Λ のあらゆる値と結合すると，形成される分子のあらゆる可能な項の完全な表を得る.

Σ-項に対しては，さらにその符号に関する問題が起こる. 分子の波動関数が $r\to\infty$ で両原子の波動関数の積（または積の和）の形に書くことができることに注意すれば，この問題は容易に解ける. 角運動量 $\Lambda=0$ は，原子のゼロでない角運動量 $M_1=-M_2$ の合成の結果として，あるいは $M_1=M_2=0$ に対して得られる. 第 1 および第 2 の原子の波動関数を $\psi_{M_1}^{(1)}$, $\psi_{M_2}^{(2)}$ であらわそう. $M=|M_1|=|M_2|\neq 0$ に対して対称化された積および反対称化された積

$$\psi^+=\psi_M^{(1)}\psi_{-M}^{(2)}+\psi_{-M}^{(1)}\psi_M^{(2)},$$
$$\psi^-=\psi_M^{(1)}\psi_{-M}^{(2)}-\psi_{-M}^{(1)}\psi_M^{(2)}$$

をつくろう.

（分子軸を含む）鉛直面での鏡映は軸への角運動量の投影の符号を変えるので，$\psi_M^{(1)}$, $\psi_M^{(2)}$ はそれぞれ $\psi_{-M}^{(1)}$, $\psi_{-M}^{(2)}$ に変わり，またそれらの逆も成り立つ. その場合関数 ψ^+ は変わらないが，ψ^- は符号を変える. つまり前者はしたがって Σ^+-項に，後者は Σ^--項に対応する. こうして M の各値に対して一つの Σ^+-項と Σ^--項が得られる. M は L_2 個の異なる値 $(M=1, \cdots, L_2)$ をとることができるので，全部で L_2 個の Σ^+-項と L_2 個の Σ^--項を得る.

ところがもしも $M_1=M_2=0$ であると，分子の波動関数は $\psi=\psi_0^{(1)}\psi_0^{(2)}$ の形につくられる. 鉛直面での鏡映に対する関数 $\psi_0^{(1)}$ の振舞いを解明するために，第 1 の原子の中心を原点とし分子軸の方向を z 軸とする座標系を選び，そして xz の鉛直面での鏡映は座標原点に関する反転を行なったのち，y 軸のまわりの 180° の回転を行なうことと等価であることに着目する. 反転を行なうと関数 $\psi_0^{(1)}$ は P_1 が乗じられる. ここで $P_1=\pm 1$ は第 1 の原子の与えられた状態の偶奇性である. つぎに波動関数に無限小の（したがってあらゆる有限の）回転演算子を作用させる結果は原子の全軌道角運動量によって決定される. したがって，軌道角運動量 l をもつ（そして角運動量の z 成分が $m=0$ である）1 電子

系原子という特別な場合を考察すれば十分である．つまり結果において l のかわりに L と書けば，任意の原子に対して求めるべき答を得る．$m=0$ をもつ電子の波動関数の角度部分は，定数因子を除いて $P_l(\cos\theta)$ である（(28.8) 参照）．y 軸のまわりの $180°$ の回転は $x\to -x,\ y\to y,\ z\to -z$ の変換であり，あるいは球座標では $r\to r,\ \theta\to\pi-\theta,\ \varphi\to\pi-\varphi$ である．それによって $\cos\theta\to -\cos\theta$ となるので，$P_l(\cos\theta)$ は $(-1)^l$ だけ乗じられる．

したがって鉛直面での鏡映の結果として関数 $\psi_0^{(1)}$ は $(-1)^{L_1}P_1$ だけ乗じられると結論される．同様にして $\psi_0^{(2)}$ は $(-1)^{L_2}P_2$ だけ乗じられるので，波動関数 $\psi=\psi_0^{(1)}\psi_0^{(2)}$ は全部で $(-1)^{L_1+L_2}P_1P_2$ だけ乗じられる．この因子が $+1$ であるか，あるいは -1 であるかによって Σ^+-項または Σ^--項となる．

得られた結果をまとめると，（おのおの適当な多重度をもつ）総数 $2L_2+1$ 個の Σ-項のうち，（もしも $(-1)^{L_1+L_2}P_1P_2=+1$ ならば）L_2+1 項は Σ^+-項であり，L_2 項は Σ^--項であり，あるいは（もしも $(-1)^{L_1+L_2}P_1P_2=-1$ ならば）その逆が成り立つ．

つぎに同種原子からなる分子に移ろう．原子のスピンおよび軌道角運動量を合成して分子の全 S および Λ をつくる規則は，異種原子からなる分子における場合と同様にここでも成り立つ．異なる点はただ項が偶または奇となり得ることである．このとき，結合される原子が同一状態にあるか，異なる状態にあるかによって，二つの場合を区別しなければならない．

もしも原子が異なる状態にあるならば[1]，可能な項の総数は（異種原子からなる場合に比べて）2倍となる．実際に，（分子軸を半分に切る位置にある）座標原点での鏡映は両原子の状態を置換させる．原子の状態の互換に関して，分子の波動関数を対称化あるいは反対称化すると，（同一の Λ および S をもつ）2項を得て，このうち一つは偶であり，他は奇である．したがって全部で同数の偶項と奇項が得られる．

これに反して，もしも両原子が同じ状態にあるとすると，状態の総数は異種原子をもつ分子における場合と比べて変わらない．これらの状態の偶奇性に関しては，研究の結果（長くなるのでそれについてはここでは立ち入らないが）[2]

---

1) たとえば中性原子とイオン化された原子の結合などを指している．

2) 参照：E. Wigner and E. Witmer, Zeitschrift für Physik, **51**, 859 (1928).

次の結論を得る.

N_g, N_u を与えられた Λ および S の値をもつ偶項および奇項の数としよう. すると：

もしも Λ が奇ならば, $N_g=N_u$ となる.

もしも Λ が偶であり, S が偶 $(S=0, 2, 4, \cdots)$ ならば, $N_g=N_u+1$ となる.

もしも Λ が偶で, S が奇 $(S=1, 3, \cdots)$ ならば, $N_u=N_g+1$ となる.

最後に Σ–項のうちではさらに Σ^+ と Σ^- を区別しなければならない. この場合には次の規則がある：

もしも S が偶ならば, $N_g^+=N_u^-+1=L+1$ となり,
もしも S が奇ならば, $N_u^+=N_g^-+1=L+1$ となる

(ここで $L_1=L_2\equiv L$). あらゆる Σ^+–項は $(-1)^S$ の偶奇性をもち, あらゆる Σ^-–項は $(-1)^{S+1}$ の偶奇性をもつ.

いままで研究してきたような分子項と $r\to\infty$ で得られる原子項との関係の問題の他に, 分子項と $r\to 0$ でつまり両核を一点に寄せて得られるはずの《合成原子》の項との関係の問題もまた考えることができる (たとえば H_2 分子項と He 原子項との関係). このことに関しては次の規則が容易に導かれる. スピン S, 軌道角運動量 L および偶奇性 P をもつ《合成原子》の項からは, 《構成原子を離す》ことにより, S と同じスピンをもち, 軸の回りの角運動量が $\Lambda=0, 1, \cdots, L$ である分子項が得られ, そしてこれらの値 Λ のおのおのに対して一つずつの項が得られる. 分子項の偶奇性は原子項の偶奇性 P と一致する ($P=+1$ のとき g, $P=-1$ のとき u). $\Lambda=0$ をもつ分子項は, もしも $(-1)^L P=+1$ ならば Σ^+–項, またもしも $(-1)^L P=-1$ ならば Σ^-–項である.

問　題

1. 基底状態にある原子の結合によって得ることができる H_2, N_2, O_2, Cl_2 分子の可能な項を決定せよ.

解 本文に記述されている規則に従って, 次の可能な項が見いだされる：

H_2 分子 (原子は ${}^2S$ 状態にある)：${}^1\Sigma_g^+$, ${}^3\Sigma_u^+$;

N_2 分子 (原子は ${}^4S$ 状態にある)：${}^1\Sigma_g^+$, ${}^3\Sigma_u^+$, ${}^5\Sigma_g^+$, ${}^7\Sigma_u^+$;

Cl_2 分子 (原子は ${}^2P$ 状態にある)：$2\,{}^1\Sigma_g^+$, ${}^1\Sigma_u^-$, ${}^1\Pi_g$, ${}^1\Pi_u$, ${}^1\Delta_g$, $2\,{}^3\Sigma_u^+$, ${}^3\Sigma_g^-$, ${}^3\Pi_g$, ${}^3\Pi_u$, ${}^3\Delta_u$;

O_2 分子（原子は ${}^3P$ 状態にある）：$2\,{}^1\Sigma_g^+$, ${}^1\Sigma_u^-$, ${}^1\Pi_g$, ${}^1\Pi_u$, ${}^1\Delta_g$, $2\,{}^3\Sigma_u^+$, ${}^3\Sigma_g^-$,
${}^3\Pi_u$, ${}^3\Pi_g$, ${}^3\Delta_u$, $2\,{}^5\Sigma_g^+$, ${}^5\Sigma_u^-$, ${}^5\Pi_g$, ${}^5\Pi_u$, ${}^5\Delta_g$

(項の記号の前にある数字は，問題にしている型の項の数を1より多い場合について示している).

2. HCl, CO 分子について同様のことを行なえ.

解 異種原子の結合においては原子の状態の偶奇性もまた重要となる．式(31.6)により H, O, C 原子の基底状態は偶であり，Cl 原子のそれは奇であることがわかる（原子の電子配置について第3表を参照）．本文に記述されている規則により次の項が見いだされる：

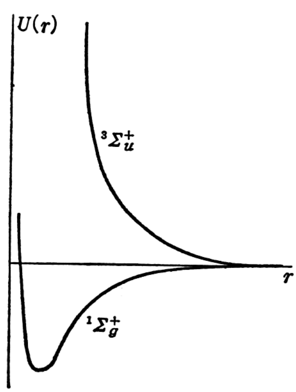
HCl 分子（原子は ${}^2S_g$, ${}^2P_u$ 状態にある）：${}^{1,3}\Sigma^+$, ${}^{1,3}\Pi$,

CO 分子（原子は ${}^3P_g$, ${}^3P_g$ 状態にある）：$2\,{}^{1,3,5}\Sigma^+$, ${}^{1,3,5}\Sigma^-$, $2\,{}^{1,3,5}\Pi$, ${}^{1,3,5}\Delta$.

§ 81. 原　子　価

互いに結合して分子をつくる原子の性質は，**原子価**の概念を用いて記述される．各原子には確定した原子価が与えられて，原子が結合するとき原子価は互いに満たされなければならない．つまり各原子の原子価結合に対しては，他の原子の原子価結合が対応しなければならない．たとえばメタン分子 CH_4 では，4価の炭素原子の四つの原子価結合が，四つの1価水素原子の原子価結合によって満たされている．原子価の物理的な説明を行なうために，もっとも簡単な例として，二つの水素原子が結合した H_2 分子から始めよう．

基底状態 (${}^2S$) にある二つの水素原子を考えよう．両者を近づけると ${}^1\Sigma_g^+$ または ${}^3\Sigma_u^+$ の分子状態にある系を得ることができる．1重項は反対称のスピン波動関数に対応し，3重項は対称関数に対応する．ところがこれに反し座標波動関数は，${}^1\Sigma$–項のとき対称であり，${}^3\Sigma$–項のとき反対称である．H_2 分子の基底項は ${}^1\Sigma$–項でしかあり得ないことは明らかである．実際，反対称波動関数 $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ ($\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ は両電子の動径ベクトル) はいかなる場合でも節をもち（この関数は $\mathbf{r}_1=\mathbf{r}_2$ でゼロとなる），したがって系の最低状態にはなり得ない．



第 29 図

数値計算の結果，電子項 ${}^1\Sigma$ は安定な H_2 分子

の形成に対応する深い極小を実際にもつことがわかる．ところが $^3\Sigma$ 状態ではエネルギー $U(r)$ は核間距離の増大とともに単調に減少し，このことは両 H 原子の相互の反発に対応している[1]（第29図）．

このようなわけで水素分子の全スピンは基低状態でゼロである；$S=0$．主族の元素の化学的に安定な化合物のほとんどすべてはこの性質をもつことがわかる．無機分子のうちで例外となるものは 2 原子分子の O_2（基底状態は $^3\Sigma$）および NO（基底状態は $^2\Pi$）と 3 原子分子の NO_2, ClO_2（全スピンは $S=1/2$）である．中間族の元素についてはあとで論ずるように特殊な性質をもっているが，その前に主族元素の原子価の性質を研究しよう．

このように，原子が互いに結合する能力は原子のスピンと関連している（W. Heitler, H. London, 1927）．結合は原子のスピンが互いに打ち消し合うように起こる．原子の互いに結合する能力の量的示数として，原子のスピンを 2 倍した整数を用いると便利である．この数が原子の化学的原子価と一致する．この場合考慮に入れなければならないことは，まったく同一の原子がどの状態にあるかによって異なる原子価をもつことができるということである．

この観点から周期律表の主族元素を考慮しよう．第 1 族元素（第 3 表の最初の縦欄，アルカリ金属類）は基底状態でスピン $S=1/2$ をもつので，その原子価は 1 である．より大きいスピンをもつ励起状態は，完全殻からの電子の励起によってのみ得ることができる．したがって，励起状態は非常に高いので，励起原子は安定な分子を形成することができない[2]．

第 2 族元素（第 3 表の第 2 の縦欄，アルカリ土類金属類）の原子は基底状態でスピン $S=0$ をもつ．したがって，基底状態ではこれらの原子は化合物をつくることができない．しかし基底状態の比較的近くに励起状態があり，それは電子配置 s^2 のかわりに sp を不完全殻にもち，全スピンは $S=1$ である．この状態における原子の原子価は 2 である；これが第 2 族元素の主な原子価である．

第 3 族元素は基底状態で，電子配置 s^2p とスピン $S=1/2$ をもっている．し

1)　ここでは原子間のファン・デル・ワールスの引力を無視している（§ 89 参照）．この力が存在すると（遠距離において）$^3\Sigma$- 項の $U(r)$ 曲線上にも極小があらわれる．しかしながらこの極小は $^1\Sigma$ 曲線上の極小に比べて非常に浅いので，第 29 図に示したスケールでは感知されにくい．

2)　Cu, Ag, Au 元素については本節の最後を参照せよ．

かし完全 s 殻からの電子励起によって，電子配置 sp^2 およびスピン $S=3/2$ をもつ励起状態が得られ，これは基底状態の近くにある．こにによりこの族の元素は1価としても，また3価としても振舞う．この族の最初の元素（B, Al）は3価としてのみ振舞う．1価の原子価が出現する傾向は原子番号の増加とともに増大し，Tl では同じ程度に1価および3価元素として振舞うようになる（たとえば化合物 TlCl, $TlCl_3$ においてである）．このことは，第3族の最初の元素においては3価元素の化合物における結合エネルギーが（1価元素の化合物に比べて）大きく，このエネルギー差が原子の励起エネルギーを越えているためである．

第4族元素では基底状態は電子配置 s^2p^2 とスピン1をもち，その近くに電子配置 sp^3 とスピン2をもつ励起状態がある．これらの状態には原子価2および4が対応する．第3族におけると同様，第4族の最初の元素（C, Si）は主として高い方の原子価を示す（例外は，たとえば化合物 CO である）が，原子番号の増大とともに低い方の原子価を示す傾向が増加する．

第5族元素の原子では基底状態は電子配置 s^2p^3 およびスピン $S=3/2$ をもち，したがって対応する原子価は3である．より大きいスピンをもつ励起状態は，主量子数が次に大きい値をもつ殻に電子一つが遷移することによってのみ得ることができる．もっとも近いこのような状態は電子配置 sp^3s' およびスピン $S=5/2$ をもつ（ここでは便宜上 s' によって，s 状態よりも主量子数が1だけ大きい電子の s 状態をあらわすことにする）．この状態の励起エネルギーは比較的大きいにもかかわらず，それでも励起原子は安定な化合物をつくることができる．このようなわけで第5族元素は3価および5価として振舞う（たとえば NH_3 における窒素は3価，HNO_3 においては5価である）．

第6族元素では基底状態（電子配置 s^2p^4）でスピンが1であるので，原子は2価である．p 電子の一つが励起してスピン2をもつ状態 s^2p^3s' がつくられるが，さらにもう一つ s 電子が励起してスピン3をもつ状態 $sp^3s'p'$ がつくられる．両方の励起状態で原子は安定な分子をつくることができて，それぞれ4価および6価を示す．その際第6族の最初の元素（酸素）は2価のみを示し，同じ族のそれに続く元素はより高い原子価をも示す（したがって H_2S, SO_2, SO_3 におけるイオウはそれぞれ2価，4価，6価である）．

第7族（ハロゲン族）では基底状態（電子配置 s^2p^5，スピン$S=1/2$）で原子は1価である．それらはまた，電子配置が s^2p^4s'，$s^2p^3s'p'$，$sp^3s'p'^2$，スピンがそれぞれ3/2，5/2，7/2である励起状態においても安定な化合物をつくることができるので，これらは原子価3,5,7に対応する．その際この族の最初の元素（F）はいつも1価であるが，それに続く元素はより高い原子価をも示す（したがってHCl，$HClO_2$，$HClO_3$，$HClO_4$における塩素はそれぞれ1，3，5，7価である）．

最後に希ガス族元素の原子は基底状態で完全に飽和した殻をもち（したがってスピンは$S=0$），それらの励起エネルギーは大きい．このようなわけで原子価はゼロであり，これらの元素は化学的に不活性である[1]．

これらすべての議論に関して，次のような一般的な注意をしておく必要がある．原子がその励起状態に特有の原子価をもって分子をつくるということは，両原子を遠距離にひき離したときに必ず励起原子を得るということをけっして意味しない．これが意味するのは，分子における電子密度の分布は，着目した原子核の回りで，孤立した励起原子の電子分布に近いものであるということだけである．この場合，核間距離を増大させたときに電子分布が収束する極限は，励起していない原子に対応することもあり得る．

原子が結合して分子をつくるとき，原子の完全電子殻はあまり変わらない．ところが不完全殻における電子密度の分布はかなり変わり得る．いわゆる**有極（イオン）結合**と呼ばれるもっとも顕著な場合には，すべての原子価電子が一つの原子から他の原子へ遷移し，その結果，分子は（eを単位として）原子価と同じ電荷をもつイオンからなるということができる．第1族の元素は電気的陽性である．つまり有極結合においてそれらの元素は電子を与え，陽イオンを

1) とはいうものの，それらのうちのあるものは（フッ素あるいは酸素と）安定な化合物をつくる．これらの原子価は外側の完全殻から比較的近いエネルギーをもつ不完全f（またはd）殻へ電子が遷移するためと考えられる．

また希ガス原子が同一元素の励起原子と相互作用して起こる特別の引力についても述べておこう．この効果は，異なる状態にある二つの同一原子を近づけたときに得られる可能な状態の数が2倍あるということによる（§ 80 参照）．一方の原子から他方の原子への励起の遷移は，この場合交換相互作用のかわりをなし，その結果ふつうの原子価を得る．このような分子の一例はHe_2分子である．同様の結合の型は，二つの同一原子からなる分子イオンにおいても起こる（例えばH_2^+）．

形成する．つぎの族へ進むにしたがって電気的陽性度はしだいに衰えていって電気的陰性に変わり，これは第7族元素にもっとも多く存在する．有極結合に関して，上で分子中の励起原子について述べた注意とまったく同じことを述べる必要がある．もしも分子が有極的であっても，このことは原子をひき離したときに必ず二つのイオンを得るということをけっして意味しない．たとえば CsF 分子からは実際に Cs^+ および F^- イオンを得るであろうが，NaF 分子は極限において Na および F の中性原子を与える（塩素の電子に対する親和エネルギーはセシウムのイオン化ポテンシャルより大きいが，ナトリウムのイオン化ポテンシャルより小さいからである）．

いわゆる**等極（共有）結合**と呼ばれる反対の極限の場合には分子中の原子は平均的に中性のままである．等極性分子は，有極性分子と違って，双極モーメントをほとんどもたない．有極結合と等極線合との間の差異は純粋に量的なものであって，あらゆる中間の場合が存在し得る．

つぎに中間族元素に移ろう．パラジウム族および白金族元素はそれらの原子価の性質に関して主族元素とあまり変わらない．相違点は，原子中の d 電子が比較的深い位置にあるために，d 電子は分子中の他の原子とあまり強く相互作用しないということである．このためにこれらの元素の化合物のうちには，ゼロとは異なる（実際には1/2を越えない）スピンをもつ分子の《非飽和》化合物が比較的多く見うけられる．各元素はいろいろな値の原子価を示すことができて，主族元素のように単に2だけ異なるばかりでなく．1だけ異なることもできる（主族元素では原子価が変わるのは，打ち消しあったスピンをもつある電子の励起によるためで，その結果同時に一対の電子のスピンが解放される）．

希土類元素は不完全 f 殻が存在するという特徴をもつ．f 電子は d 電子よりもはるかに深い位置にあり，このために原子価に対して何ら関与しない．したがって希土類元素の原子価は不完全殻の s および p 電子によってのみ決定される[1]．しかしながら，原子が励起するとき f 電子は s および p 状態に遷移することができて，それにより原子価を1だけ増大させることを考慮しなければならない．このため希土類元素も1だけ異なる原子価を示す（実際にはそれらは

1）ある希土類元素の原子の不完全殻にある d 電子は重要でない．というわけは，これらの原子は，d 電子が存在しないような励起状態において化合物をつくるからである．

3価および4価ばかりである).

アクチニド族元素は独特の位置を占めている. Ac および Th は一般に f 電子を含まず，それらの原子価には d 電子が関している. このためアクチニド族元素は化学的性質に関してパラジウム族および白金族元素と似ているが，希土類元素とは似ていない. ウランに関していえば，基底状態でU原子は f 電子を含むにもかかわらず，その化合物では f 電子を含まない. 最後に Np, Pu, Am, Cm 元素の原子は化合物においても f 電子を含むが，原子価に関与する電子は s および d 電子である. この意味でこれらの元素はウランと同類である. 《不対》s および d 電子の可能な最大数はそれぞれ1および5である. したがって，アクチニド族元素の最大の原子価は6である（これに反し，希土類元素の最大の原子価は，原子価に関与する s および p 電子をもつので $1+3=4$ である).

鉄族元素はその原子価の性質に関して，希土類元素とパラジウム・白金族元素との中間的な位置を占めている. 鉄族元素の原子中で d 電子は比較的深い位置にあり，多くの化合物において原子価結合にまったく関与しない. したがって，これらの化合物において鉄族元素は希土類元素のように振舞う. ここでいっているのは，金属原子が単純に陽イオンの形で入っているイオン結合型の化合物のことである（たとえば $FeCl_2$, $FeCl_3$). 希土類元素のように，鉄族元素はこれらの化合物中で，まったくいろいろな値の原子価を示すことができる.

鉄族元素の別の型の化合物は，いわゆる**錯化合物**と呼ばれるものである. それらの特徴は，中間族元素の原子が単純なイオンの形で分子に入っているのではなく，合成された錯イオンの部分をなしているという点にある（たとえば $KMnO_4$ 中の MnO_4^- イオン，$K_4Fe(CN)_6$ 中の $Fe(CN)_6^{----}$ イオン). このような錯イオンでは原子は単純なイオン化合物におけるよりも，互いにより接近しており，このため d 電子は原子価結合に関与する. このようなわけで，錯化合物では鉄族元素はパラジウムおよび白金族元素のように振舞う.

最後に，§73 で主族に分類された Cu, Ag, Au 元素はいくつかの化合物中で中間族のように振舞うことを述べる必要がある. これらの元素は，d 殻からエネルギーの近い p 殻へ電子が遷移するために（たとえば Cu では $3d$ から $4p$ へ)，1よりも大きい原子価を示すことができる. これらの化合物では原子は

不完全 d 殻をもち，このため中間族のように振舞う（Cu は鉄族元素のように，また Ag, Au は Pd および Pt 族元素のように振舞う）．

問　　題

基底状態にある水素原子とそれから（ボーア半径に比べて）大きい核間距離 R にある H^+ イオンとの結合によって得られる分子イオン H_2^+ の電子項を決定せよ（エリ・デ・ランダウ Л. Д. Ландау, 1961; C. Herring, 1961）[1]．

解　この問題の形は§50，問題3と似ている．二つの1次元ポテンシャルの井戸のかわりに，ここでは（二つの核の回りの）二つの3次元井戸があり，それらは核を結ぶ線の回りの軸対称をもっている．（水素原子の基底準位である）準位 $E_0=-1/2$ は[2]，二つの準位 $U_g(R)$ および $U_u(R)$（${}^2\Sigma_g^+$ および ${}^2\Sigma_u^+$ 項）に分裂する．これらは（x 軸上の点 $x=\pm R/2$ にある）核の間の距離を2等分する平面 $x=0$ に関して対称および反対称の電子波動関数

$$\psi_{g,u}(x,y,z)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0(x,y,z)\pm\psi_0(-x,y,z)]$$

に対応する．ここで $\psi_0(x,y,z)$ は一つのポテンシャル井戸の中の電子波動関数である．

§50，問題3で行なったのとまったく同様にして，

$$U_{g,u}(R)-E_0=\mp\iint\psi_0\frac{\partial\psi_0}{\partial x}dydz \tag{1}$$

を得る．ここで積分は平面 $x=0$ にわたって行なわれる[3]．

（たとえば点 $x=R/2$ にある核1の回りの運動に対応する）関数 ψ_0 は

$$\psi_0=\frac{a}{\sqrt{\pi}}e^{-r_1} \tag{2}$$

の形に求められる．ここで a はゆっくり変化する関数である（水素原子では $a=1$）．関数 ψ_0 はシュレーディンガー方程式

$$\frac{1}{2}\triangle\psi+\left(-\frac{1}{2}-\frac{1}{R}+\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)\psi=0 \tag{3}$$

を満足しなければならない（r_1，r_2 は核1および2から電子までの距離である）．この方程式で電子の全エネルギーは差 E_0-1/R で与えられる．そのわけは，E_0 自身は核のクーロン反発エネルギー $1/R$ をも含んでいるからである．

関数 ψ_0 は x 軸から離れると急速に減少するので，積分(1)では（R に比べて）y, z の

---

1) H_2 分子に対する同種の問題の解は次の文献を見よ．L. P. Gor'kov, L. P. Pitaevskii, Soviet Physics Doklady, **8**, 788, 1964; C. Herring, M. Flicker, Physical Review, **134** A 362, 1964（このうち第二の論文は第一の論文における計算の誤りを訂正している）．

2) ここでは原子単位を使うことにする．

3) したがって求められている効果は，電子が両方の核と同じように相互作用する距離の範囲によって決定されることを強調しよう．

小さい範囲のみが重要である．$y, z \ll R$ に対して（2）を（3）に代入すると

$$\frac{\partial a}{\partial x}+\frac{a}{R/2+x}-\frac{a}{R}=0$$

を得る（ここでゆっくり変化する関数 a の2次微分を無視し，また $r_2 \approx R/2+x$ と置いた）．$x \to R/2$ で（つまり核1の付近で）1となるようなこの方程式の解は

$$a=\frac{2R}{R+2x}\exp\left(\frac{x}{R}-\frac{1}{2}\right)$$

である．すると（1）式は

$$U_{g,u}-E_0=\mp\frac{4}{\pi e}\int_{\frac{R}{2}}^{\infty}e^{-2r_1}2\pi r_1 dr_1=\mp 2Re^{-R-1}$$

となる．

分裂の大きさは

$$U_g-U_u=-4Re^{-R-1} \tag{4}$$

である[1]．

十分大きい距離では，この式は指数関数的に減少するので，H 原子と H^+ イオンとの双極相互作用に関する2次近似の効果よりもこの式は小さくなる．基底状態における水素原子の分極率は 9/2 であり（(77.9) 参照），H^+ イオンの場は $\mathscr{E}=1/R^2$ であるので，これに対応する相互作用のエネルギーは $-9/4R^4$ となり，そのことを考慮して

$$U_{g,u}(R)-E_0=\mp 2Re^{-R-1}-\frac{9}{4R^4} \tag{5}$$

を得る．

第2項は $R=10.8$ においてのみ第1項と同程度となる．U_u-項は $R=12.6$ で -5.8×10^{-5} 原子単位 (-1.6×10^{-3} eV) の極小値をとる[2]．

§ 82. 2原子分子の1重項の振動構造および回転構造

すでに本章の最初で述べたように，核と電子の質量の差が大きいために分子のエネルギー準位を決定する問題は二つの部分に分けることができる．最初に静止核に対する電子系のエネルギー準位が核間距離の関数として決定される（電子項）．そのあとで与えられた電子状態に対して核の運動を考察することができる．この場合核は法則 $U_n(r)$ に従って互いに相互作用する粒子とみなされる．ここで U_n は対応する電子項である．分子の運動は全体としての併進運動

1) H_2 分子に対する同様の結果は（上に述べた論文を参照せよ）：$U_g-U_u=-1.64\cdot R^{5/2}e^{-2R}$．

2) この極小はファン・デル・ワールス力によるもので，安定イオン H_2^+ の基底状態に対応する $U_g(R)$- 項の極小に比べて非常に浅い．この後者の極小は $R=2.0$ で -0.60 原子単位（-16.3 eV）を与える．

と分子の重心に関する核の運動とから成り立つ．併進運動はもちろん興味がないので，重心は静止しているとみなすことができる．

記述の便宜上，最初に分子の全スピン S がゼロである電子項（1重項）を考察しよう．法則 $U(r)$ に従って相互作用する二つの（核）粒子の相対運動の問題は，中心対称場 $U(r)$ にある質量 M（両粒子の換算質量）をもつ1粒子の問題に帰着されることを知っている． $U(r)$ は着目している電子項のエネルギーをあらわしている．ところで中心対称場 $U(r)$ における運動の問題はつぎに，$U(r)$ および遠心エネルギーの和に等しい有効エネルギーをもつ場の中の1次元運動の問題に帰着される．

分子の全角運動量を $\boldsymbol{K}$ であらわそう． これは電子の軌道角運動量 $\boldsymbol{L}$ および核の回転の角運動量からなる．すると核の遠心エネルギー演算子は

$$B(r)(\hat{\boldsymbol{K}}-\hat{\boldsymbol{L}})^2$$

となる．ここで記号

$$B(r)=\frac{\hbar^2}{2Mr^2} \tag{82.1}$$

を2原子分子理論にならって導入した．（与えられた r に対して）この量を平均すると，r の関数として遠心エネルギーを得る．それは有効なポテンシャル・エネルギー $U_K(r)$ の中に含まれなければならない．したがって

$$U_K(r)=U(r)+B(r)\overline{(\boldsymbol{K}-\boldsymbol{L})^2} \tag{82.2}$$

となる．ここで上線は上に述べた平均をあらわす．

分子が全角運動量の自乗の確定値 $\boldsymbol{K}^2=K(K+1)$（K は整数）をもち，電子の角運動量の分子軸（z 軸）への投影の確定値 $L_z=\Lambda$ をもつような状態に対する平均を行なおう．(82.2) の括弧を展開すると

$$U_K(r)=U(r)+B(r)K(K+1)-2B(r)\overline{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{K}+B(r)\overline{\boldsymbol{L}^2} \tag{82.3}$$

を得る． 最後の項は電子状態にのみ依存し， 量子数 K をまったく含まない．したがってこの項は単にエネルギー $U(r)$ の中に含めることができる． その一つ前の項についてもまったく同じことが言えることを示そう．

もしもある軸への角運動量の投影が確定値をもつならば，全角運動量ベクトルの平均値もこの同じ軸に平行であることを思い出そう（§27の終りの説明を見よ）． z 軸に沿っての単位ベクトルを $\boldsymbol{n}$ であらわすと，$\overline{\boldsymbol{L}}=\Lambda\boldsymbol{n}$ を得る．さらに古典力学において2粒子（核）からなる系の回転の角運動量は，$[\boldsymbol{rp}]$ であ

る．ここで $\boldsymbol{r}=r\boldsymbol{n}$ は2粒子間の動径ベクトル，$\boldsymbol{p}$ はそれらの相対運動の運動量である．この量は $\boldsymbol{n}$ の方向に垂直である．量子力学でも，核の回転の角運動量演算子について同じことが言える．すなわち $(\hat{\boldsymbol{K}}-\hat{\boldsymbol{L}})\boldsymbol{n}=0$ または $\hat{\boldsymbol{K}}\boldsymbol{n}=\hat{\boldsymbol{L}}\boldsymbol{n}$ である．演算子が等しければ，もちろんそれらの固有値もまた等しい．ところが $\boldsymbol{nL}=L_z=\Lambda$ であるから

$$\boldsymbol{Kn}=\Lambda \tag{82.4}$$

となる．このようなわけで，(82.3) の後から二つ目の項において，量 $\overline{\boldsymbol{LK}}=\boldsymbol{nK}\Lambda=\Lambda^2$ となり，K に依存しない．関数 $U(r)$ を新しく定義しなおすと，実効的なポテンシャル・エネルギーは最後に次の形に書ける：

$$U_K(r)=U(r)+B(r)K(K+1). \tag{82.5}$$

等式 $K_z=\Lambda$ より，Λ の与えられた値に対して，量子数 K は

$$K\geq\Lambda \tag{82.6}$$

の値しかとることができない．

ポテンシャル・エネルギー (82.5) をもつ1次元のシュレーディンガー方程式を解くと，一連のエネルギー準位が得られる．（与えられた各 K に対して）これらの準位をその増大する順序に従って数字 v を用いて番号づけることにする．ここで v は値 $v=0,1,2,\cdots$ をとり，$v=0$ が最低準位に対応する．このようにして核の運動は各電子項を一連の準位に分裂させ，それらの準位は，二つの量子数 K および v の値で特徴づけられる．

（与えられた電子項に対する）このような準位の数は有限でもあり得るし，無限でもあり得る．もしも $r\to\infty$ の極限で分子が二つの孤立中性原子になるような電子状態であれば，ポテンシャル・エネルギー $U(r)$ [およびそれに伴って $U_K(r)$] は $r\to\infty$ で（二つの孤立原子のエネルギーの和である）一定の極限値 $U(\infty)$ に $1/r$ よりも早く収束する（§89参照）．このような場における準位の数は有限である（§18参照）．もっとも，実際には分子の準位の数はたいへん多い．この場合準位の分布のしかたは次の通りである．与えられた K の各値に対して（v の値の異なる）一定数の準位があり，そして同一の K に対する準位の数は K が増大するにつれて減少し，K がある値に達するとそれより上には準位が存在しなくなる．

これに反して，もしも $r\to\infty$ で分子が二つのイオンに分解するならば，遠距

離で $U(r)-U(\infty)$ はクーロン則 ($\sim 1/r$) に従うイオンの引力エネルギーを与える．このような場では無限個の準位があり，極限値 $U(\infty)$ に近づくに従って準位は接近してくる．基底状態において大多数の分子は最初の場合があてはまり，比較的少数の分子が核を分離するとイオンをつくるということを強調しておく．

エネルギー準位の量子数依存性は一般的な形で完全な計算を行なうことができない．このような計算は，基底準位の上のあまり高くない位置にある，比較的弱く励起された準位に対してのみ可能である[1]．このような準位には量子数 K および v の大きくない値が対応している．分子スペクトルの研究ではたいていこのような準位を扱うことになるので，このような準位が特に興味がある．

弱く励起された状態にある核の運動は，平衡位置のまわりの微小振動によって特徴づけられる．これにより $U(r)$ を差 $\xi=r-r_e$ のベキ級数で展開することができる．ここで r_e は $U(r)$ が極小をとる r の値である．$U'(r_e)=0$ となるので，2次の項までとって $U(r)=U_e+\dfrac{M\omega_e^2}{2}\xi^2$ を得る．ここで $U_e=U(r_e)$，ω_e は振動数である．(82.5) 式において，遠心エネルギーをあらわす第2項 $K(K+1)$ の値は小さいので $r=r_e$ と置いても十分である．こうして

$$U_K(r)=U_e+B_eK(K+1)+\frac{M\omega_e^2}{2}\xi^2 \tag{82.7}$$

を得る．ここで $B_e=\hbar^2/2Mr_e^2=\hbar^2/2I$ は**回転定数**と呼ばれるものである ($I=Mr_e^2$ は分子の慣性モーメントである)．

(82.7) の最初の2項は定数であるが，第3項は1次元の調和振動に対応している．したがって求めているエネルギー準位はいきなり次のように書ける：

$$E=U_e+B_eK(K+1)+\hbar\omega_e\left(v+\frac{1}{2}\right). \tag{82.8}$$

このようなわけで，考えている近似において，エネルギー準位は三つの独立な部分からなる：

$$E=E^{el}+E^r+E^v. \tag{82.9}$$

第1項 ($E^{el}=U_e$) は電子エネルギーである ($r=r_e$ における核のクーロン相互作用のエネルギーを含んでいる)．

---

1) ここで問題にしているのは，与えられた同一の電子項から得られる準位のことである．

$$E^r = B_e K(K+1) \tag{82.10}$$

は分子の回転による**回転エネルギー**である[1]．最後に第3項

$$E^v = \hbar\omega_e\left(v+\frac{1}{2}\right) \tag{82.11}$$

は分子内部の核の振動エネルギーである．番号 v は定義に従って，与えられた K の値をもつ準位をその増大する順序で番号づける．この数 v は**振動量子数**と呼ばれる．

ポテンシャル・エネルギー曲線 $U(r)$ の与えられた形に対して，振動数 ω_e は $\sqrt{M}$ に逆比例する．したがって振動準位間の間隔 ΔE^v もまた $1/\sqrt{M}$ に比例する．回転準位間の間隔 ΔE^r は分母に慣性モーメント I を含んでいるので，$1/M$ に比例する．ところが電子準位間の間隔 ΔE^{el} は，これらの準位自身と同様まったく M を含まない．m/M (m は電子質量) は2原子分子理論の小さいパラメーターであるので，

$$\Delta E^{el} \gg \Delta E^v \gg \Delta E^r \tag{82.12}$$

となることがわかる．この不等式は分子のエネルギー準位の分布の特別の性質をあらわしている．核の振動運動により電子項は互いに比較的接近した準位に分裂する．これらの準位はつぎに，分子の回転運動の影響によってなおいっそう微細な分裂を引き起こす[2]．

つぎの近似ではエネルギーを振動と回転の独立な部分に分離すことはもはや不可能である．その場合には同時に K および v を含む回転－振動項があらわ

---

1) (スピンをもたない)二原子分子の回転を記述する波動関数は，対称こまの波動関数と本質的に同じである (§ 103)．こまと違って分子の回転は分子軸の方向を決定する全部で二つの角 ($\alpha\equiv\varphi$, $\beta\equiv\theta$) で記述される．回転の波動関数は (103.8) とくらべて因子 $e^{ik\gamma}/\sqrt{2\pi}$ がない点と量子数のあらわし方が異なっている．(82.4) により数 Λ は全角運動量 $\boldsymbol{K}$ の分子軸 (§ 103 では ζ 軸) への投影に等しいので，記号を $J, M, k \to K, M, \Lambda$ (ここで $M=K_z$) と置きかえなければならない．したがって

$$\psi_{\mathrm{rot}}(\varphi, \theta) = i^K\sqrt{\frac{2K+1}{4\pi}}D^{(K)}_{\Lambda M}(\varphi, \theta, 0).$$

2) たとえば U_e, $\hbar\omega_e$ および B_e の値を (電子ボルトの単位で) いくつかの分子について示す：

	H_2	N_2	O_2
$-U_e$	4.7	7.5	5.2
$\hbar\omega_e$	0.54	0.29	0.20
$10^3\times B_e$	7.6	0.25	0.18

れる．より高次の近似を計算すると，量子数 K および v のベキ級数の展開形で準位 E を得るはずである．

ここでは（82.8）の次の近似を計算しよう．このためには $U(r)$ を ξ の4次の項まで展開しなければならない（§38, 問題3参照），同様に遠心エネルギーの展開を ξ^2 の項まで行なう．すると

$$U_K(r)=U_e+\frac{M\omega_e^2}{2}\xi^2+\frac{\hbar^2}{2Mr_e^2}K(K+1)-a\xi^3+b\xi^4$$
$$-\frac{\hbar^2}{Mr_e^3}K(K+1)\xi+\frac{3\hbar^2}{2Mr_e^4}K(K+1)\xi^2 \qquad (82.13)$$

を得る．

ここで（82.13）の終わりの4項を摂動演算子とみなして，固有値（82.8）に対する補正を計算しよう．このため ξ^2 および ξ^4 をもつ項に対しては摂動論の1次近似だけで十分であるが，ξ および ξ^3 をもつ項に対しては2次近似を計算しなければならない．そのわけは ξ および ξ^3 の対角行列要素は恒等的にゼロであるからである．計算に必要なすべての行列要素は§23および§38問題3で計算されている．計算の結果，ふつう次のような形に書かれる式を得る：

$$E=E^{el}+\hbar\omega_e\left(v+\frac{1}{2}\right)-x_e\hbar\omega_e\left(v+\frac{1}{2}\right)^2$$
$$+B_vK(K+1)-D_eK^2(K+1)^2. \qquad (82.14)$$

ここで

$$B_v=B_e-\alpha_e\left(v+\frac{1}{2}\right)\equiv B_0-\alpha_e v \qquad (82.15)$$

である．定数 x_e, B_e, α_e, D_e は（82.14）にあらわれた定数と次の関係をもつ：

$$B_e=\frac{\hbar^2}{2I}, \qquad D_e=\frac{4B_e^3}{\hbar^2\omega_e^2}$$

$$\alpha_e=\frac{6B_e^2}{\hbar\omega_e}\left(\frac{a\hbar}{M\omega_e^2}\sqrt{\frac{2}{MB_e}}-1\right), \quad x_e=\frac{3}{2\hbar\omega_e}\left(\frac{\hbar}{M\omega_e}\right)^2\left(\frac{5}{2}\frac{a^2}{M\omega_e^2}-b\right). \qquad (82.16)$$

v および K に依存しない項は E^{el} に含まれている．

問　　題

二原子分子において電子および核の運動の分離を許す近似の精度を評価せよ．

解　分子の全ハミルトニアンを $\hat{H}=\hat{T}_r+\hat{H}_{el}$ の形に置こう．ここで $\hat{T}_r=\hat{\boldsymbol{p}}^2/2M$ は核

の相対運動の運動エネルギー演算子である（$\hat{\boldsymbol{p}}=-i\hbar\partial/\partial\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{r}$ は核間距離のベクトル，M はそれらの換算質量である）．またハミルトニアン $\hat{H}_{el}$ は，電子の運動エネルギー，電子どうしおよび電子と核とのクーロン相互作用のポテンシャル・エネルギーならびに核のクーロン相互作用エネルギーの演算子を含んでいる．シュレーディンガー方程式

$$\hat{H}\psi=(\hat{T}_r+\hat{H}_{el})\psi=E\psi \tag{1}$$

の解を

$$\psi=\sum_m \chi_m(\boldsymbol{r})\varphi_m(q,\boldsymbol{r}) \tag{2}$$

の形に求めよう．ここで関数 $\varphi_m(q,\boldsymbol{r})$ は方程式

$$\hat{H}_{el}\varphi_m(q,\boldsymbol{r})=U_m(r)\varphi_m(q,\boldsymbol{r}) \tag{3}$$

の規格直交化された解である（q は電子の座標の全体をあらわす）．$U_m(r)$ はハミルトニアン $\hat{H}_{el}$ の固有値で，パラメーターとしての r に依存する．(2) を方程式 (1) に代入し，左から $\varphi_n^*(q,\boldsymbol{r})$ を掛け，q に関して積分すると

$$\left[\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2M}+V''_{nn}+U_n(r)-E\right]\chi_n(\boldsymbol{r})=-\sum_m{}'(V'_{nm}+V''_{nm})\chi_m(\boldsymbol{r}) \tag{4}$$

を得る．ここで

$$V'_{nm}=\frac{1}{M}\boldsymbol{p}_{nm}\hat{\boldsymbol{p}},\qquad V''_{nm}=\frac{1}{2M}(\boldsymbol{p}^2)_{nm}$$

である．また $\boldsymbol{p}_{nm}=\int\varphi_n^*\hat{\boldsymbol{p}}\varphi_m dq$ であり，$(\boldsymbol{p}^2)_{nm}$ は電子の波動関数に関する行列要素である．$\boldsymbol{p}_{nm}$ の対角要素は対称性によりゼロとなる．

電子の関数 φ_n は原子の程度の距離にわたってのみ大きく変化する．したがって $\boldsymbol{r}$ に関するそれの微分は大きいパラメーター M/m（m は電子の質量）を導入しない．したがって量 V''_{nn} は $U_n(r)$ にくらべて m/M の比で小さく，無視することができる．もしも (4) 式の右辺の項を小さい摂動とみなすことができるならば，0次近似において関数 $\chi_n(\boldsymbol{R})$ は場 $U_n(r)$ の中の核の運動を記述する方程式

$$\left[\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2M}+U_n(r)\right]\chi_{nv}=E_{nv}\chi_{nv} \tag{5}$$

の解によって与えられる（v はこの核の運動の量子数である）．摂動論の適用条件は次式が成り立つことを要求する：

$$|\langle nv'|V'_{nm}+V''_{nm}|mv\rangle|\ll|E_{nv'}-E_{mv}|.$$

この不等式の右辺は異なる電子項の間のエネルギー差をあらわしている．この量は微小量のパラメーター m/M に関して0次の程度である．左辺は核の波動関数に関する行列要素をあらわしている．V''_{nm} の項は m/M を含み，当然ながら小さい．V'_{nm} の行列要素では，関数 χ_{mv} に作用する演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}$ は，核の運動量の程度の量を関数に掛ける．もしも核が小さい振動を行なっていると，核の運動量は $\sim\sqrt{M\hbar\omega_e}$ の程度である．同時に振動数 ω_e は $\sqrt{M}$ に逆比例するので，行列要素 $\langle nv'|V'_{nm}|mv\rangle$ は微小量 $(m/M)^{3/4}$ の程度である．

§83. 多重項. a の場合

さてゼロでないスピンSをもつ分子の準位を分類する問題に移ろう. ゼロ次近似では相対論的効果をまったく無視することができて, 分子のエネルギーはあらゆる一般の粒子系のエネルギーと同じく, スピンの方向に依存せず（スピンは《自由》である), 準位は $(2S+1)$-重に縮退している. ところが相対論的相互作用を考慮すると縮退した準位は分裂し, その結果エネルギーは分子軸へのスピンの投影値に依存するようになる. 分子における相対論的相互作用としては, **スピン－軸**相互作用をとりあげよう. その場合には（原子におけると同様）スピンと電子の軌道運動との相互作用が基本的な役割を果たす[1].

分子準位の性質および分類は, 一方ではスピンと軌道運動との相互作用の果す, 他方では分子回転の果たす相対的な役割に本質的に依存している. 後者の役割は, 隣接する回転準位間の距離によって定められる. このようなわけで, 二つの極限的な場合を考察しなければならない. そのうちの一方ではスピン－軸相互作用エネルギーが回転準位の間隔に比べて大きく, 他方では小さい. 前者の場合は **a の場合**（または結合型）と呼ばれ, 後者は **b の場合** と呼ばれる (F. Hund, 1933).

もっともよくあらわれるのは a の場合である. 例外は Σ-項で, そのときスピン－軸相互作用の効果は小さいので, 主として b の場合が起こる（後の説明参照)[2]. 他の項に対してはもっとも軽い分子において b の場合がときどき起こる. そのわけは, その場合にスピン－軸相互作用が比較的弱く, 回転準位間の距離が大きいからである（慣性モーメントは小さい).

もちろん a と b の間の中間的な場合もまた可能である. まったく同一の電子状態が回転量子数の変化により連続的に a の場合から b の場合に移行することがあることも考慮する必要がある. これは隣接する回転準位間の距離は回転量子数の増大とともに増加するためである. このため, 大きい回転量子数に対して回転準位間の距離はスピン－軸結合のエネルギーよりも大きくなることがあ

---

1) スピン－軌道相互作用およびスピン－スピン相互作用の他に, なおスピンおよび電子の軌道運動と分子回転との相互作用が存在する. しかし相互作用のこの部分は非常に小さく, それを考察することはスピン $S=1/2$ をもつ項に対してのみ興味がある場合がある (§84参照).

2) 特別な場合は O_2 分子の基底電子項 ($^3\Sigma$-項) である. ここでは a と b の間の中間的な結合型が起こっている (§84, 問題3参照).

る（b の場合）．それでいて低い回転準位に対しては a の場合が起こっている．

a の場合に準位の分類は，スピンがゼロの項の分類と原理的にほとんど変わらない．最初に静止核に対して電子項を考察しよう．つまり回転を完全に無視するのである．電子の軌道角運動量の投影 Λ の他に，ここで全スピンの分子軸への投影を考慮しなければならない．この投影は Σ であらわされる[1]．それは値 $S, S-1, \cdots, -S$ をとる．スピン投影の方向が，軸の回りの軌道角運動量の方向と一致するとき Σ は正であるとみなすことにする（Λ は後者の絶対値をあらわしていることを思い起こせ）．二つの量 Λ および Σ は合成されて分子軸の回りの電子の全角運動量をつくる：

$$\Omega=\Lambda+\Sigma. \tag{83.1}$$

これは値 $\Lambda+S, \Lambda+S-1, \cdots, \Lambda-S$ をとる．このようなわけで，軌道角運動量 Λ をもつ電子項は Ω の値の異なる $2S+1$ 項に分裂する（この分裂のことを原子項の場合と同様，電子準位の微細構造または多重項分裂と呼ぶ）．Ω の値はふつう，項をあらわす記号の右下に記入される．したがって，$\Lambda=1$, $S=1/2$ に対して項 $^2\Pi_{1/2}$, $^2\Pi_{3/2}$ を得る．

核の運動を考慮するとこれらの各項には振動構造および回転構造があらわれる．異なる回転準位は分子の全角運動量をあらわす量子数 J の値で特徴づけられる．この分子の全角運動量には電子の軌道およびスピン角運動量と核の回転の角運動量が含まれている[2]．この量子数は $|\Omega|$ から始まる整数をとる：

$$J\geqq|\Omega| \tag{83.2}$$

（これは明らかに規則（82.6）の一般化である）．

a の場合に分子準位を決定する定量的公式を導こう．まず最初に電子項の微細構造を考察しよう．§72 で原子項の微細構造を研究したときに公式（72.4）を用いたが，それによるとスピン－軌道相互作用の平均値は原子の全スピンの軌道角運動量ベクトルへの投影に比例している．まったく同様にして，2原子分子におけるスピン－軸相互作用は（与えられた核間距離 r に対する電子状態で平均して），分子の全スピンの分子軸への投影 Σ に比例し，したがって分裂

---

1) $\Lambda=0$ をもつ項の記号と混同してはならない！

2) 記号 $\boldsymbol{K}$ はスピンを考慮に入れない分子の全角運動量に対してふつう用いられる．a の場合，角運動量 $\boldsymbol{K}$ は近似的にさえも保存されないので，量子数 K は存在しない．

した分子項を次の形に書くことができる：

$$U(r)+A(r)\Sigma.$$

ここで $U(r)$ は最初の（分裂していない）項のエネルギーであり，$A(r)$ は r のある関数である．この関数は最初の項に（とくに Λ の値に）依存するが，Σ には依存しない．ふつうは量子数 Σ でなく Ω が用いられるので，$A\Sigma$ のかわりに $A\Omega$ と書いた方が便利である．両者の差異は $A\Lambda$ だけであるので，これは $U(r)$ に含めることができる．このようにして電子項に対する表式

$$U(r)+A(r)\Omega \tag{83.3}$$

を得る．

分裂した項の成分は互いに等間隔だけ離れていることに注目すべきである．Ω の値が1だけ異なる隣接する成分の間の距離は $A(r)$ であり，Ω に依存しない．

一般的な考察から容易にわかるように，Σ-項に対して A の値はゼロである．それをみるために時間の符号を変える操作を行なおう．このときエネルギーは変わってはならないが，分子の状態に関しては軸の回りの軌道およびスピン角運動量の方向が逆転するという変化がある．エネルギー $A(r)\Sigma$ において Σ の符号は変わるが，エネルギーが変わらないためには，$A(r)$ もまた符号が変わる．もしも $\Lambda\neq0$ ならば，量 $A(r)$ の値に関していかなる結論を導くこともできない．そのわけは，$A(r)$ は軌道角運動量に依存し，軌道角運動量自身符号を変えるからである．ところが，もしも $\Lambda=0$ ならば $A(r)$ は変わらず，したがって恒等的にゼロでなければならない，とあらゆる場合にいうことができる．このようなわけで Σ-項に対して1次近似におけるスピン－軌道相互作用は分裂を起こさない．（Σ^2 に比例した）分裂があらわれるのは，2次近似においてこの相互作用を考慮するか，あるいは1次近似においてスピン－スピン相互作用を考慮したときのみであって，それは比較的小さい．Σ-項に対してはふつう b の場合が起こるという前に述べた事実はこのことに関連している．

多重項分裂を決定したのちに，前節§82の始めに行なったのとまったく同様の議論で，摂動として分子の回転を考えることができる．核の回転の角運動量は全角運動量から電子の軌道角運動量とスピンを差し引くことによって得られる．したがって，遠心エネルギー演算子は次の形をとる：

$$B(r)(\hat{\boldsymbol{J}}-\hat{\boldsymbol{L}}-\hat{\boldsymbol{S}})^2.$$

この量を電子状態について平均し，(83.3) に加えると，求めている有効ポテンシャル・エネルギー $U_J(r)$ を得る：

$$U_J(r)=U(r)+A(r)\Omega+B(r)\overline{(\boldsymbol{J}-\boldsymbol{L}-\boldsymbol{S})^2}$$
$$=U(r)+A(r)\Omega+B(r)[\boldsymbol{J}^2-2\boldsymbol{J}\overline{(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S})}+\overline{\boldsymbol{L}^2}+2\overline{\boldsymbol{L}\boldsymbol{S}}+\overline{\boldsymbol{S}^2}].$$

$\boldsymbol{J}^2$ の固有値は $J(J+1)$ である．つぎに §82 におけると同様の議論で

$$\overline{\boldsymbol{L}}=\boldsymbol{n}\Lambda,\quad \overline{\boldsymbol{S}}=\boldsymbol{n}\Sigma \tag{83.4}$$

を得る．また $(\hat{\boldsymbol{J}}-\hat{\boldsymbol{L}}-\hat{\boldsymbol{S}})\boldsymbol{n}=0$ であるので，固有値に対して次式を得る：

$$\boldsymbol{J}\boldsymbol{n}=(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S})\boldsymbol{n}=\Lambda+\Sigma=\Omega. \tag{83.5}$$

これらの値を代入すると次式を得る：

$$U_J(r)=U(r)+A(r)\Omega+B(r)[J(J+1)-2\Omega^2+\overline{\boldsymbol{L}^2}+2\overline{\boldsymbol{L}\boldsymbol{S}}+\overline{\boldsymbol{S}^2}].$$

電子状態に関する平均はゼロ次近似[1]の波動関数を用いて行なわれる．しかしこの近似においてスピンの大きさは保存される；したがって $\boldsymbol{S}^2=S(S+1)$．また波動関数はスピン関数と座標関数の積である；したがって角運動量 $\boldsymbol{L}$ および $\boldsymbol{S}$ の平均は互いに独立に行なわれるので，次式を得る：

$$\overline{\boldsymbol{L}\boldsymbol{S}}=\Lambda\boldsymbol{n}\overline{\boldsymbol{S}}=\Lambda\Sigma.$$

最後に軌道角運動量の自乗 $\boldsymbol{L}^2$ の平均値はスピンに依存せず，それ自身 r のある関数であり，与えられた（非分裂）電子項を特徴づけている．r の関数であり，J および Σ に依存しない項はすべて $U(r)$ に含めることができ，Σ（または同じことだが Ω）に比例する項は表式 $A(r)\Omega$ に含めることができる．このようにして有効ポテンシャル・エネルギーに対する式を得る：

$$U_J(r)=U(r)+A(r)\Omega+B(r)[J(J+1)-2\Omega^2]. \tag{83.6}$$

分子のエネルギー準位は，これから，§82 で式 (82.5) を用いたのと同一の方法で得ることができる．$U(r)$ および $A(r)$ を ξ のベキ級数で展開し，$U(r)$ の展開式では 2 次の項までをとり，第 2 項および第 3 項の展開式ではゼロ次の項のみをとると，次の形のエネルギー準位を得る：

$$E=U_e+A_e\Omega+\hbar\omega_e\left(v+\frac{1}{2}\right)+B_e[J(J+1)-2\Omega^2]. \tag{83.7}$$

ここで $A_e=A(r_e)$，B_e は与えられた（非分裂）電子項に特有の定数である．

---

1) 分子の回転効果に関しても，またスピン－軸相互作用に関してもゼロ次近似とする．

展開をより高次に進めると，量子数についてより高次の項がなお得られる．ここではそれらを書き下すことはしない．

§ 84. 多重項．*b* の場合

さて *b* の場合に移ろう．ここでは分子の回転効果が多重項分裂を圧倒している．このためまず第一にスピン－軸相互作用を無視して回転効果を考察し，しかるのちにスピン－軸相互作用を摂動としてとり入れなければならない．

《自由な》スピンをもつ分子では，全角運動量 $\boldsymbol{J}$ のみならず，電子の軌道角運動量と核の回転角運動量との和 $\boldsymbol{K}$ もまた保存され，$\boldsymbol{K}$ は $\boldsymbol{J}$ と次の関係にある：

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{K}+\boldsymbol{S}. \qquad (84.1)$$

量子数 K は，自由なスピンをもつ回転分子の異なる状態を区別し，これの状態は与えられた電子項から得られる．K の与えられた値をもつ状態における有効ポテンシャル・エネルギー $U_K(r)$ は，明らかに $S=0$ をもつ項に対する式(82.5) と同一の式によって決定される：

$$U_K(r)=U(r)+B(r)K(K+1). \qquad (84.2)$$

ここで K は $\Lambda,\ \Lambda+1, \cdots$ の値をとる．

スピン－軸相互作用を含めると，各項は一般に $(2S+1)$（または，もしも $K<S$ なら $2K+1$）項に分裂し，これらの項は全角運動量 J の値が異なっている[1]．角運動量合成の一般則により，数 J は（与えられた K に対して）$K+S$ から $|K-S|$ までの値をとる：

$$|K-S|\leqq J\leqq K+S. \qquad (84.3)$$

（摂動論の１次近似で）分裂エネルギーを計算するには，スピン－軸相互作用エネルギー演算子の平均値を（この相互作用に関して）ゼロ次近似の状態について決定しなければならない．いまの場合，このことは，電子状態に関する平均と（考えられた r に対する）分子の回転に関する平均とを意味する．この最初の平均の結果は，$A(r)\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{S}}$ の形の演算子が得られ，これはスピン演算子の分子軸への投影に比例している．つぎにこの演算子を分子の回転に関して平均す

1)　*b* の場合ではスピンの分子軸への投影 $\boldsymbol{nS}$ は確定値をもたない．したがって量子数 Σ（および Ω）は存在しない．

る．その場合スピン・ベクトルの方向は任意であるとする．すると $\overline{\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{S}}}=\overline{\boldsymbol{n}}\hat{\boldsymbol{S}}$. 平均値 $\overline{\boldsymbol{n}}$ は対称性の考察により，《ベクトル》$\hat{\boldsymbol{K}}$ と同じ方向をとらなければならないベクトルである．$\hat{\boldsymbol{K}}$ は分子の回転を特徴づけるただ一つのベクトルである．こうして次のように書くことができる：

$$\overline{\boldsymbol{n}}=\mathrm{const}\cdot\hat{\boldsymbol{K}}.$$

この等式の両辺に $\hat{\boldsymbol{K}}$ を掛け，固有値 $\boldsymbol{nK}=\Lambda$ ((82.4) 参照)，$\boldsymbol{K}^2=K(K+1)$ に注意すれば比例係数を容易に決定できる．したがって

$$\overline{\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{S}}}=\frac{\Lambda}{K(K+1)}\hat{\boldsymbol{K}}\hat{\boldsymbol{S}}.$$

最後に積 $\boldsymbol{KS}$ の固有値は一般公式 (31.3) により

$$\boldsymbol{KS}=\frac{1}{2}[J(J+1)-K(K+1)-S(S+1)] \qquad (84.4)$$

である．

これらの結果，スピン－軸相互作用エネルギーの求めている平均値に対して次の表式が得られる：

$$A(r)\frac{\Lambda}{2K(K+1)}[J(J+1)-S(S+1)-K(K+1)]$$
$$=A(r)\frac{\Lambda}{2K(K+1)}(J-S)(J+S+1)-\frac{1}{2}A(r)\Lambda.$$

これをエネルギー (84.2) に加えなければならない．このとき項 $(1/2)A(r)\Lambda$ は K および J に依存しないので，$U(r)$ に含めることができて，最終的に有効ポテンシャル・エネルギーに対する次の表式を得る：

$$U_K(r)=U(r)+B(r)K(K+1)+A(r)\Lambda\frac{(J-S)(J+S+1)}{2K(K+1)}. \qquad (84.5)$$

$\xi=r-r_e$ のベキで展開すると，いつもと同じようにして b の場合の分子のエネルギー準位に対する表式が得られる：

$$E=U_e+\hbar\omega_e\left(v+\frac{1}{2}\right)+B_eK(K+1)+A_e\Lambda\frac{(J-S)(J+S+1)}{2K(K+1)}. \qquad (84.6)$$

すでに前節で示したように，Σ-項ではスピン－軌道相互作用は１次近似で多重項分裂を起こさず，微細構造を決定するためには電子スピンに関して自乗の演算子をもつスピン－スピン相互作用を考慮しなければならない．われわれにとって興味があるのはこの演算子自身ではなく，それを分子の電子状態に関し

て平均した結果であって，そのやり方はスピン－軌道相互作用演算子に対してなされたのと同様である．対称性の考察から明らかなように，求めている平均された演算子は，分子の全スピンの軸への投影の自乗に比例しなければならない．すなわち次の形に書くことができる：

$$\alpha(r)(\hat{\boldsymbol{S}}\boldsymbol{n})^2. \tag{84.7}$$

ここで $\alpha(r)$ はふたたび，与えられた電子項に対して特徴的な，距離 r のある関数である（対称性は $\hat{\boldsymbol{S}}^2$ に比例する項をも許す．しかしこれは興味がない．それはスピンの絶対値は単に定数であるからである）．われわれはここでは演算子（84.7）による分裂をあらわす長い一般式を導くことはよそう；本節の問題1に Σ-3重項に対する式を導いてある．

Σ-2重項は特別の場合にあたる．クラマースの定理（§60）により，全スピン $S=1/2$ をもつ粒子系においては，系の中にいかなる内部的な相対論的相互作用を考えても，2重縮退がけっして解かれることがない．このため $^2\Sigma$-項は，スピン－軌道およびスピン－スピン相互作用を（いかなる近似の程度において）考慮しても分裂を起こさない．

ここで分裂が得られるのは，スピンと分子回転との相対論的相互作用を考慮した場合のみである；この効果は非常に小さい．この相互作用の平均された演算子は明らかに $\gamma\hat{\boldsymbol{K}}\hat{\boldsymbol{S}}$ の形をもち，その固有値は式（84.4）で決定されるが，ここで $S=1/2,\ J=K\pm1/2$ と置かなければならない．その結果 $^2\Sigma$-項に対して次式を得る：

$$E=U_e+\hbar\omega_e\left(v+\frac{1}{2}\right)+B_eK(K+1)\pm\frac{\gamma}{2}\left(K+\frac{1}{2}\right) \tag{84.8}$$

ここで U_e に定数 $-\gamma/4$ を含めた．

問　　題

1. b の場合に $^3\Sigma$-項の多重項分裂を決定せよ（H. A. Kramers; 1929）．

解　求めている分裂は演算子（84.7）によって決定され，それは分子の回転に関して平均されなければならない．それを $\alpha_e n_i n_k \hat{S}_i \hat{S}_k$ の形に書こう；ここで $\alpha_e=\alpha(r_0)$ と記す．$\boldsymbol{S}$ は保存されるベクトルであるので，積 $n_i n_k$ のみが平均されなければならない．§29の問題で得られた同様の式により次式を得る：

$$\overline{n_i n_k}=-\frac{\hat{K}_i\hat{K}_k+\hat{K}_k\hat{K}_i}{(2K-1)(2K+3)}+\cdots.$$

ここで，J に依存しないエネルギーへの寄与を与える（δ_{ik} に比例した）項は，考えている分裂をひき起こさないので，書かなかった．こうして分裂は，次の演算子によって決定される：

$$-\frac{\alpha_e}{(2K-1)(2K+3)}\hat{S}_i\hat{S}_k(\hat{K}_i\hat{K}_k+\hat{K}_k\hat{K}_i).$$

$\hat{\boldsymbol{S}}$ は $\hat{\boldsymbol{K}}$ と可換であるので

$$\hat{S}_i\hat{S}_k\hat{K}_i\hat{K}_k=\hat{S}_i\hat{K}_i\hat{S}_k\hat{K}_k=(\boldsymbol{SK})^2.$$

ここで固有値 $\boldsymbol{SK}$ は式 (84.4) によって与えられる．次に

$$\begin{aligned}\hat{S}_i\hat{S}_k\hat{K}_k\hat{K}_i&=\hat{S}_i\hat{S}_k\hat{K}_i\hat{K}_k+i\hat{S}_i\hat{S}_ke_{kil}\hat{K}_l\\&=(\boldsymbol{SK})^2-\frac{1}{2}(\hat{S}_i\hat{S}_k-\hat{S}_k\hat{S}_i)ie_{ikl}\hat{K}_l\\&=(\boldsymbol{SK})^2+\frac{1}{2}e_{ikl}e_{ikm}\hat{S}_m\hat{K}_l\\&=(\boldsymbol{SK})^2+\boldsymbol{SK}\end{aligned}$$

を得る．

3 重項 $^3\Sigma(S=1)$ の 3 成分 E_K には $J=K,\ K\pm1$ が対応している．これらの成分間の間隔に対しては次の値を得る：

$$E_{K+1}-E_K=-\alpha_e\frac{K+1}{2K+3},\qquad E_{K-1}-E_K=-\alpha_e\frac{K}{2K-1}.$$

2. a と b の中間の場合について $\Lambda\neq0$ をもつ 2 重項のエネルギーを決定せよ (E. Hill, J. H. van Vleck; 1928).

解　回転エネルギーおよびスピン－軸相互作用エネルギーは同程度の値をもつと考えられるので，両者は摂動論で同時に考えなければならない．したがって摂動演算子は次の形をもつ[1]：

$$\hat{V}=B_e\hat{\boldsymbol{K}}^2+A_e\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{S}}.$$

ゼロ次近似の波動関数としては，角運動量 K および J の確定値をもつ状態の波動関数（すなわち b の場合の関数）を用いるのが便利である．2 重項に対して $S=1/2$ であるので，与えられた J に対し量子数 K は $K=J\pm1/2$ の値をとることができる．永年方程式をつくるためには，行列要素 $\langle nSKJ|V|nSK'J\rangle$ を計算する必要がある（n は電子項を決定する量子数の総体をあらわす）．ここで $K,\ K'$ は上に示した値をとる．演算子 $\hat{\boldsymbol{K}}^2$ の行列は対角的である（対角要素は $K(K+1)$ である）．また $(\boldsymbol{nS})$ の行列要素は一般式 (109.5) を用いて計算される（ここで j_1, j_2, J は S, K, J と置かれる）；$\boldsymbol{n}$ の行列要素は式 (87.4) により与えられる．計算の結果，次の永年方程式を得る：

1) 回転に関する平均を行なう前に，振動に関する平均を行なわなければならない．このため（ξ に関する展開式の第 1 項のみをとって）関数 $B(r)$ および $A(r)$ を値 B_e, A_e で置きかえて，非摂動エネルギー準位として次式を得る：$E^{(0)}=U_e+\hbar\omega_e(v+1/2)$.

$$\begin{vmatrix} B_e(J+1/2)(J+3/2)-A_e\dfrac{\Lambda}{2J+1}-E^{(1)} & \dfrac{A_e}{2J+1}\sqrt{(J+1/2)^2-\Lambda^2} \\ \dfrac{A_e}{2J+1}\sqrt{(J+1/2)^2-\Lambda^2} & B_e(J+1/2)(J-1/2)+A_e\dfrac{\Lambda}{2J+1}-E^{(1)} \end{vmatrix}=0.$$

この方程式を解き，非摂動エネルギーに $E^{(1)}$ を加えると次式を得る：

$$E=U_e+\hbar\omega_e(v+1/2)+B_eJ(J+1)\pm\sqrt{B_e^2(J+1/2)^2-A_eB_e\Lambda+A_e^2/4}$$

(U_e の中に定数 $B_e/4$ を含めた)．a の場合に対応するのは $A_e\gg B_eJ$ であり，b の場合に対応するのは逆の不等式である．

3. a と b の中間の場合について3重項準位 $^3\Sigma$ の成分間の間隔を決定せよ．

解　問題2におけると同様，回転エネルギーとスピン－スピン相互作用エネルギーは摂動論で同時にとり扱われなければならない．摂動演算子は次の形をもつ：

$$\hat{V}=B_e\hat{\boldsymbol{K}}^2+\alpha_e(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{S}})^2.$$

ゼロ次近似の波動関数としては，b の場合の関数を用いよう．行列要素 $\langle K|\boldsymbol{nS}|K'\rangle$ (行列が対角的であるすべての添字は省略した)はふたたび式(109.5)および(87.4)により計算される．ただしこの場合 $\Lambda=0$, $S=1$ である．ゼロと異なる要素は次の形をもつ：

$$\langle J|\boldsymbol{nS}|J-1\rangle=\sqrt{\frac{J+1}{2J+1}},\qquad \langle J|\boldsymbol{nS}|J+1\rangle=\sqrt{\frac{J}{2J+1}}.$$

与えられた J に対して K は $K=J,\ J\pm1$ の値をとる．行列要素 $\langle K|V|K'\rangle$ に対しては次式を得る：

$$\langle J|V|J\rangle=B_eJ(J+1)+\alpha_e,\qquad \langle J-1|V|J-1\rangle=B_e(J-1)J+\alpha_e\frac{J+1}{2J+1},$$

$$\langle J+1|V|J+1\rangle=B_e(J+1)(J+2)+\alpha_e\frac{J}{2J+1},$$

$$\langle J-1|V|J+1\rangle=\langle J+1|V|J-1\rangle=\alpha_e\frac{\sqrt{J(J+1)}}{2J+1}.$$

$K=J$ をもつ状態と $K=J\pm1$ をもつ状態との間には遷移が起こらないことがわかる．したがって準位のうちの一つは単に $E_1=\langle J|V|J\rangle$ である．他の二つ (E_2, E_3) は，$J\pm1$ の状態間の遷移に対する行列要素からつくられる2行2列の永年方程式を解いた結果得られる．3重項の成分の相対的な間隔のみに興味があるので，三つの各エネルギー E_1, E_2, E_3 から定数 α_e を差し引く．その結果，次式を得る：

$$E_1=B_eJ(J+1).$$

$$E_{2,3}=B_e(J^2+J+1)-\frac{\alpha_e}{2}\pm\sqrt{B_e^2(2J+1)^2-\alpha_eB_e+\frac{\alpha_e^2}{4}}.$$

b の場合には (α は小さい)，同じ K をもち異なる J ($J=K$, $K\pm1$) をもつ三つの準位を考えると，ふたたび問題1で求めた式を得る．

§ 85. 多重項．*c* および *d* の場合

a および b 結合の場合とそれらの中間の場合の他に，別の型の結合もまた存

在する．このような型の結合が起こる原因はつぎのとおりである．量子数 Λ があらわれるわけは，せんじつめると分子内の両原子の電気的相互作用によるもので，これが電子項を決定する問題の軸対称性をもたらすことによる（分子内のこの相互作用を，軌道角運動量と軸との結合という）．異なる値の Λ をもつ項の間の距離がこの相互作用の大きさの程度を与える．いままでの議論では，すべてこの相互作用は暗に十分大きいと仮定してきた．したがって，これらの距離は多重項分裂における間隔にくらべても，また項の回転構造の間隔にくらべても大きいとしてきた．しかしながらまた逆の場合もあって，そこでは軌道角運動量と軸との相互作用は，他の効果に比べて同程度かまたはより小さい；このような場合にはもちろん，いかなる近似においても軌道角運動量の軸への投影は保存されず，したがって量 Λ は意味を失う．

もしも軌道角運動量の軸との結合がスピン－軌道結合に比べて小さいならば，**c の場合**と呼ばれる．これは希土類元素の原子を含む分子に見いだされる．これらの原子の特徴は打ち消しあわない角運動量をもつ f 電子が存在することである；これらの角運動量と分子軸との相互作用は原子内の f 電子の位置が深いために弱められている．a および c の中間の結合型は重い原子からなる分子に見いだされる．

もしも軌道角運動量の軸との結合が回転構造の間隔にくらべて小さいならば，**d の場合**と呼ばれる．この場合は，もっとも軽い分子 (H_2, He_2) の電子項の高い（大きい J をもつ）回転準位に見いだされる．これらの項の特徴は分子内で強く励起された電子が存在することである；この励起電子と残りの電子（または，いわゆる分子の《芯》）との相互作用は十分小さいので，励起電子の軌道角運動量は分子軸に沿って量子化されない（これに反し《芯》は軸のまわりに確定した角運動量 Λ_{core} をもつ）．

核間距離 r が増大すると，両原子間の相互作用は弱まり，最終的には原子内のスピン－軌道相互作用にくらべて小さくなる．したがって十分大きい r に対して電子項を考察すると，c の場合を扱うことになる．このような事情を考慮して，分子の電子項と $r\to\infty$ で得られる原子の状態との対応を明らかにする必要がある．§80 ではスピン－軌道相互作用を無視してこの対応を考察した．ところが項の微細構造を考慮すると，孤立原子の全角運動量 J_1 および J_2 の値と

分子の量子数 Ω の値との対応についての問題が新しく発生する．われわれはここでは，§80 で展開されたのとまったく同じ議論をくり返すのは避けて，結果だけを述べよう．

もしも分子が異種原子からなるとすると，角運動量 J_1 および $J_2(J_1 \geqq J_2)$ をもつ両原子の結合によって得られる $|\Omega|$ の可能な値は[1]，(80.1) とまったく同じ表によって決定され，ここで L_1, L_2 のかわりに J_1, J_2 と書き，Λ のかわりに $|\Omega|$ と書かなければならない．差異はただ次の点にある．すなわち半整数の J_1+J_2 に対して，$|\Omega|$ の最小値は表に示されている通りのゼロでなく 1/2 である．ところが整数の J_1+J_2 に対しては，$\Omega=0$ をもつ項が $2J_2+1$ あり，これに対しては（微細構造を無視した場合の Σ–項に対するのと同様に）項の符号を決める問題が発生する．もしも J_1 および J_2 がともに半整数ならば，数 $(2J+1)$ は偶数であり，0^+ および 0^- と名づけるべき項が同数だけ存在する．もしも J_1 および J_2 がともに整数ならば，（もしも $(-1)^{J_1+J_2}P_1P_2=1$ ならば）(J_2+1) 個の項は 0^+，J_2 個の項は 0^- であり，または（もしも $(-1)^{J_1+J_2}P_1P_2=-1$ ならば）その逆が成り立つ．

もしも分子が異なる状態にある同種原子からなるとすると，その結果得られる分子状態は，次の点のみを除いて異種原子からなる場合とまったく同様である．すなわち項の総数は2倍となり，各項は一度は偶項としてあらわれ，一度は奇項としてあらわれる．

最後に，もしも分子が（角運動量 $J_1=J_2\equiv J$ をもつ）同じ状態にある同種原子からなるとすると，状態の総数は異種原子からなる場合と同じであるが，偶奇性に関する分配は次のようになる：

もしも J が整数であり，Ω が偶数ならば，　$N_g=N_u+1,$

もしも J が整数であり，Ω が奇数ならば，　$N_g=N_u,$

もしも J が半整数であり，Ω が偶数ならば，　$N_u=N_g,$

もしも J が半整数であり，Ω が奇数ならば，　$N_u=N_g+1.$

ここですべての 0^+–項は偶項であり，すべての 0^-–項は奇項である．

---

1) 2原子の全角運動量 J_1 および J_2 が合成されて合成角運動量 Ω がつくられる場合，Ω の符号は明らかに重要でない．

核を近づけるに従って，c 型結合はふつう a 型結合に移行する[1]．この場合次に述べるような興味深い事情が起こることがある．

すでに述べたように，$\Lambda=0$ をもつ項は b の場合に属する．a の場合を分類する観点からすると，このことは（$\Lambda=0$ が同じで）Ω の異なる値をもつ多重項準位が同じエネルギーに対応することを意味する．しかしこのような準位は，微細構造の異なる状態にある原子を近づけることによって起こり得る．

このようなわけで，原子の微細構造状態が異なる対が同一の分子項に対応するということが起こり得る．同様の事情が $\Omega=0$ をもつ項に対しても起こり得る．これは核を近づけることにより $\Lambda\neq0$（したがって $\Sigma=-\Lambda$）をもつ分子項に移行する．これらの準位は 2 重に縮退している．そのわけは，0^+- および 0^--項（これらは原子状態が異なる対からつくることができる）は a の場合に同じエネルギーに対応するからである[2]．

§ 86. 分子項の対称性

§78 ではすでに，2 原子分子項の対称性のいくつかの性質を考察した．これらの性質は，核の座標を変えない変換に対する波動関数の振舞いによって特徴づけられた．たとえば分子軸を含む平面での鏡映に関する分子の対称性により，Σ^+- および Σ^--項の間の差異が生まれる．また（同種原子からなる分子に対しては）[3]，すべての電子座標の符号の反転に関する対称性により，偶項および奇項の区別が生まれる．

これらの対称性の性質は電子項を特徴づけ，同一の電子項に属するすべての回転準位に対して同じである．

つぎに分子の状態は，（あらゆる一般の粒子系と同じく——§30 参照）同時にすべての電子と核の座標の符号を変える反転に関する振舞いによって特徴づけられる．

このことにより，分子のあらゆる項は**正項**（その波動関数は電子と核の座標

---

1) a 型項の分類と c 型項の分類の間の対応は，一般的な形で導くことができない．そのためには同じ対称性の準位は交差しないという規則（§79）を考慮して，ポテンシャル・エネルギーの曲線を具体的に考察する必要がある．

2) ここではいわゆる Λ 型 2 重項（§88 参照）を無視している．

3) 座標原点は分子軸の上に，両核間距離の半分の位置に選ばれる．

の符号の反転によって変わらない）および**負項**（その波動関数は反転によって符号を変える）に分類される[1]．

$\Lambda\neq 0$ に対して，分子軸の回りの角運動量の可能な二つの方向に対応して，各項は2重に縮退している．反転操作の結果，角運動量それ自身は符号を変えないが，そのかわり分子軸の方向が反転し（原子が位置を変える!），そのため分子軸のまわりの角運動量 Λ の方向もまた反転する．したがって同一のエネルギー準位に属する二つの波動関数は互いに変換され，それらの関数から座標反転に関して不変の線形結合，およびこの変換に対して符号を変える線形結合をいつもつくることができる．このようにして各項に対して二つの状態が得られ，そのうち一つは正であり，他は負である．実際には $\Lambda\neq 0$ をもつ各項は分裂しており（§88参照），そのためこれらの二つの状態はエネルギーの異なる値に対応している．

Σ-項はその符号を決定するために特別の考察を必要とする．まず最初に明らかなことは，スピンは項の符号に関係をもたないということである；反転操作は波動関数のスピン部分を不変のまま，粒子の座標のみを変える．このため，与えられたいかなる項の多重構造もそのあらゆる成分は同じ符号をもつ．いいかえると，項の符号は K のみに依存するが，J には依存しない[2]．

分子の波動関数は電子および核の波動関数の積であらわされる．§82で示されたように，Σ 状態において核の運動は，中心対称場 $U(r)$ における軌道角運動量 K をもつ1粒子の運動と同等である．したがって座標の符号の変化に対して核の波動関数は $(-1)^K$ を乗ぜられるということができる（(30.7) 参照）．

電子の波動関数は電子項を特徴づける．そして反転に対する電子波動関数の振舞いを解明するためには，核に固定し，核とともに回転する座標系においてこの関数を考察しなければならない．xyz を空間に静止した座標系，$\xi\eta\zeta$ を回転座標系とし，その中で分子は全体として静止しているものとする．$\xi\eta\zeta$ 軸の

1）ここでは一般に用いられている用語に従う．しかし，この用語は適当でない．それは原子の場合には反転操作に関する項の振舞いは項の偶奇性と呼ばれ，符号とは呼ばれないからである．

Σ-項に対しては，ここでいう符号を，項の右肩に指数の形であらわした + および − 記号と混同してはならない．

2）Σ-項に対してはふつう b の場合が起こっているので，量子数 K および J を用いなければならないことを思い起こせ．

方向は次のようにして決める；ζ軸は分子軸と一致させ，たとえば核1から核2への方向とし，$\xi\eta\zeta$軸の正方向の相互の配置はxyz系と同じようにとる（すなわち，もしもxyz系が右手系ならば，$\xi\eta\zeta$系も右手系でなければならない）．反転操作の結果，xyz軸の方向は反転し，右手系の座標は左手系となる．このとき$\xi\eta\zeta$系もまた左手系とならなければならない．しかしζ軸は核に固定されているので，最初の方向を保つ；このためにはξまたはη軸のどちらか一つの方向が反転しなければならない．このため静止座標系における反転操作は，運動座標系における分子軸を含む平面での鏡映と同等である．しかしこのような鏡映に対して，Σ^+-項の電子波動関数は変わらないが，Σ^--項のそれは符号を変える．

このようなわけで，Σ^+-項の回転成分の符号は因子$(-1)^K$によって与えられる；偶数のKをもつすべての準位は正で，奇数のそれは負である．Σ^--項に対して回転準位の符号は因子$(-1)^{K+1}$で与えられる；偶数のKをもつすべての準位は負で，奇数のそれは正である．

もしも分子が同種原子からなるならば[1]，そのハミルトニアンは両核の座標の互換に関してもまた不変である．もしも核の互換に対して波動関数が変わらないならば，その項は核に関して**対称**と呼ばれ，もしも波動関数が符号を変えるならば**反対称**と呼ばれる．核に関する対称性は項の偶奇性および符号と密接に関連している．核の座標の互換は，全粒子（電子および核）の座標の符号を変えた後，電子のみの座標の符号を変えることと同等である．このことから，もしも項が偶（奇）で同時に正（負）ならば，その項は核に関して対称であるということが導かれる．もしも項が偶（奇）で同時に負（正）ならば，その項は核に関して反対称である．

§62の終わりに，二つの同種粒子からなる系の座標波動関数は，系の全スピンが偶数のときは対称であり，奇数のときは反対称であるという一般定理を確立した．もしもこの結果を同種原子からなる分子の二つの核に適用すると，項の対称性は，両核のスピン$\boldsymbol{i}$を合成した結果得られる合成スピン$\boldsymbol{I}$の偶奇性に関連していることがわかる．Iが偶数のとき項は対称で，Iが奇数のとき項は

1）両原子は同一の元素であるばかりでなく，同一の同位体である必要がある．

反対称である[1]．たとえば，もしも核がスピンをもたない $(i=0)$ とすると，I はゼロになる；このため分子は反対称の項をもつことはけっしてない．核のスピンは分子項に対して重要な間接的影響を与えているが，これに反し，その直接的な影響（項の超微細構造）はとるに足りない．

核のスピンを考慮すると，準位の付加的な縮退が起こる．§62 ではまた，二つのスピン i の合成によって得られる I の値が偶数および奇数である状態の数を計算した．それによると，半整数の i に対して偶数の I をもつ状態の数は $i(2i+1)$ であり，奇数の I をもつ状態の数は $(i+1)(2i+1)$ である．上に述べたことにより，半整数の i に対して対称項および反対称項の縮退度 g_s, g_a[2] の比は，次の値をもつことが結論される：

$$\frac{g_s}{g_a}=\frac{i}{i+1}. \tag{86.1}$$

また整数の i に対しては同様にして，この比は次の値をもつ：

$$\frac{g_s}{g_a}=\frac{i+1}{i}. \tag{86.2}$$

項 Σ^+ の回転成分の符号は数 $(-1)^K$ によって決定されることはすでに見た．したがって，たとえば項 Σ_g^+ の回転成分は，偶数の K に対して正であり，したがって対称であるが，奇数の K に対しては負であり，したがって反対称である．上に得られた結果を考慮すると，準位 Σ_g^+ の回転成分の核についての統計的重みは，Kの逐次的な値に対して比（86.1）または（86.2）の値を交互にとると結論できる．まったく同様の事情が準位 Σ_u^+ に対しても，また Σ_g^-, Σ_u^- に対しても起こる．とくに，$i=0$ に対しては，項 Σ_u^+, Σ_g^- では偶数の K をもつ準位の，また項 Σ_g^+, Σ_u^- では奇数の K をもつ準位の統計的重みはゼロである．いいかえると，電子状態 Σ_u^+, Σ_g^- には偶数の K をもつ回転状態は存在せず，また状態 Σ_g^+, Σ_u^- には奇数の K をもつ回転状態は存在しない．

核スピンと電子との相互作用が特別に弱いために，分子の衝突においてさえも I が変わる確率は非常に小さい．したがって，I の偶奇性の異なる分子，す

1）項の偶奇性，符号および対称性の間の関連を考慮すると，核の合成スピン I が偶数のとき正の準位は偶であり，負の準位は奇であるが，I が奇数のときは逆が成り立つ．

2）このことに関連した準位の縮退度は，しばしば準位の**統計的重み**と呼ばれる．公式（86.1），（86.2）は対称および反対称準位についての核の統計的重みの比を決定する．

なわちそれぞれ対称項のみまたは反対称項のみをもつ分子は，実際には物質の異なる形のように振舞う．このような例は，**オルソ水素**および**パラ水素**である；前者の分子では二つの核のスピン $i=1/2$ は平行で $(I=1)$，後者では反平行 $(I=0)$ である．

§ 87. 2原子分子に対する行列要素

本節では2原子分子の物理量の行列要素に対する一般公式がいくつか導かれる．はじめにスピンがゼロの状態間の遷移に対する行列要素を考察しよう．

動かない核をもつ分子を特徴づけるあるベクトル性の物理量（例えば分子の双極電気モーメントまたは磁気モーメント）を $\boldsymbol{A}$ としよう．この量をまず分子とともに回転する座標系 $\xi\eta\zeta$ で考察しよう（ここで軸 ζ は分子軸と一致している）．この座標系に対する分子の角運動量（すなわち電子の角運動量 $\boldsymbol{L}$）は完全には保存されないが，その ζ-成分が保存される．したがって量子数 $L_\zeta=\Lambda$ に関する選択規則が効力をもつ（これは§29における量子数 M に関する選択規則と同じである．したがって，ベクトルのゼロでない行列要素は

$$\langle n'\Lambda|A_\zeta|n\Lambda\rangle, \qquad \langle n'\Lambda|A_\xi+iA_\eta|n,\Lambda-1\rangle,$$
$$\langle n',\Lambda-1|A_\xi-iA_\eta|n\Lambda\rangle \tag{87.1}$$

である（n は与えられた Λ に対する電子項の番号である）．

もしも両方の電子項が Σ-項であるならば，分子軸を通る平面での鏡映に関する対称性に関連した選択規則をも考慮しなければならない．この鏡映においてふつうの（極性）ベクトルの ζ-成分は符号を変えないが，軸性ベクトルは符号を変える．このことから極性ベクトルでは $\Sigma^+\to\Sigma^+$ および $\Sigma^-\to\Sigma^-$ の遷移に対してのみゼロとならない行列要素をもつが，軸性ベクトルでは $\Sigma^+\to\Sigma^-$ の遷移に対してのみゼロとならない行列要素をもつ．成分 A_ξ, A_η に関しては議論する必要がない．なぜならばそれらに対して，Λ の変わらない遷移は一般に不可能だからである．

もしも分子が同一原子から成るならば，偶奇性に関する選択規則もあらわれる．極性ベクトルの成分は反転に対して符号を変える．したがって極性ベクトルの行列要素は異なる偶奇性の状態間の遷移に対してのみゼロでない（軸性ベクトルに対しては逆が成り立つ）．とくに極性ベクトルのあらゆる対角行列要

素は恒等的にゼロである.

行列要素 (87.1) と動かない座標系 xyz における同じベクトルの行列要素との関係の問題は，任意の軸対称の物理系に対して後に(§110 で) 得られる一般公式により解かれる.

量子数 M_K (分子の全角運動量 $\boldsymbol{K}$ の z-成分) への依存性 (これはあらゆるベクトルに対して一般的である)を分離したあとには，既約行列要素 $\langle n'K'\Lambda'\|A\|nK\Lambda\rangle$ が残される. これと行列要素 (87.1) との関係は公式 (110.7) で (ベクトルに対応して) $k=k'=1$ と置き，量子数のとり方の適当な変更を行なったものによって決定される (ここで (82.4) により量子数 Λ は全角運動量 $\boldsymbol{K}$ の ζ-成分に等しい). 1階の球テンソルの成分とベクトルのデカルト成分との間の関係 (107.1) に注意し，§106 の第9表 (528頁) の 3-j 記号の値を用いると，Λ に関する対角行列要素に対する次の公式が得られる：

$$\begin{aligned}\langle n'K\Lambda\|A\|nK\Lambda\rangle&=\Lambda\sqrt{\frac{2K+1}{K(K+1)}}\langle n'\Lambda|A_\zeta|n\Lambda\rangle,\\ \langle n',K-1,\Lambda\|A\|nK\Lambda\rangle&=i\sqrt{\frac{K^2-\Lambda^2}{K}}\langle n'\Lambda|A_\zeta|n\Lambda\rangle.\end{aligned}\tag{87.2}$$

また Λ に関する非対角行列要素に対しては次の公式が得られる：

$$\begin{aligned}&\langle n'K\Lambda\|A\|nK,\Lambda-1\rangle\\ &\quad=\left[\frac{(2K+1)(K+\Lambda)(K-\Lambda+1)}{4K(K+1)}\right]^{1/2}\langle n'\Lambda|A_\xi+iA_\eta|n,\Lambda-1\rangle,\\ &\langle n'K\Lambda\|A\|n,K-1,\Lambda-1\rangle\\ &\quad=i\left[\frac{(K+\Lambda)(K+\Lambda-1)}{4K}\right]^{1/2}\langle n'\Lambda|A_\xi+iA_\eta|n,\Lambda-1\rangle,\\ &\langle n',K-1,\Lambda\|A\|nK,\Lambda-1\rangle\\ &\quad=i\left[\frac{(K-\Lambda)(K-\Lambda+1)}{4K}\right]^{1/2}\langle n'\Lambda|A_\xi+iA_\eta|n,\Lambda-1\rangle.\end{aligned}\tag{87.3}$$

これ以外のゼロでない行列要素は，これらの式で，既約行列要素に対する次のようなエルミート関係式

$$\langle nK\Lambda\|A\|n'K'\Lambda'\rangle=\langle n'K'\Lambda'\|A\|nK\Lambda\rangle^*,$$

および $\xi\eta\zeta$ の座標系における行列要素

$$\begin{aligned}\langle n\Lambda|A_\xi-iA_\eta|n'\Lambda'\rangle&=\langle n'\Lambda'|A_\xi+iA_\eta|n\Lambda\rangle^*,\\ \langle n\Lambda|A_\zeta|n'\Lambda'\rangle&=\langle n'\Lambda'|A_\zeta|n\Lambda\rangle^*\end{aligned}$$

を考慮して得られる.

分子の軸に沿っての単位ベクトルに等しいベクトル $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{n}$ の行列要素に対する公式を特に書こう. この場合には単に $A_\xi=A_\eta=0$, $A_\zeta=1$ であるので, $\xi\eta\zeta$ 座標系では対角要素 $\langle n\Lambda|A_\zeta|n\Lambda\rangle=1$ のみがゼロでない. 既約行列要素は K を除くあらゆる添字に関して対角的である. この添字についてだけ書くと,

$$\langle K\|n\|K\rangle=\Lambda\sqrt{\frac{2K+1}{K(K+1)}},\qquad \langle K-1\|n\|K\rangle=i\sqrt{\frac{K^2-\Lambda^2}{K}}\quad(87.4)$$

を得る (H. Hönl, F. London, 1925). $\Lambda=0$ のときこれらの式は

$$\langle K\|n\|K\rangle=0,\qquad \langle K-1\|n\|K\rangle=i\sqrt{K}$$

となる. これは当然期待されるように, 中心対称場における運動に対する単位ベクトルの行列要素に一致する ((29.14) 参照).

これらの式はゼロでないスピンをもつ状態間の遷移に対してどのように変更されなければならないかを示そう. ここで重要なことは, 状態が a の場合に属するか b の場合に属するかということである.

もしも両方の状態が a の場合に属しているならば, 公式は本質的に記号についてだけ変更される. 量子数 K および M_K は存在せず, その代りに全角運動量 J とその z-成分 M_J がある. それだけでなく, 数 S および $\Omega=\Lambda+\Sigma$ が加わって, 既約行列要素は

$$\langle n'J'S'\Omega'\Lambda'\|A\|nJS\Omega\Lambda\rangle$$

と書かれる.

$\boldsymbol{A}$ を何らかの軌道 (つまりスピンに依存しない) ベクトルであるとしよう. その演算子はスピン $\hat{\boldsymbol{S}}$ の演算子と可換であり, したがってその行列要素は量子数 $S, S_\zeta=\Sigma$ に関して対角的である. 量子数 $\Omega=\Lambda+\Sigma$ はしたがって Λ とともに変わる (すなわち $\Omega'-\Omega=\Lambda'-\Lambda$). 公式 (87.2)-(87.4) は行列要素に添字が追加されるという関係においてのみ変わり, 残りの因子は $K,\Lambda\to J,\Omega$ のように変えなければならない. 例えば (87.2) の最初の式は

$$\langle n'J\Omega\Lambda\|A\|nJ\Omega\Lambda\rangle=\Omega\sqrt{\frac{2J+1}{J(J+1)}}\langle n'\Omega\Lambda|A_\zeta|n\Omega\Lambda\rangle$$

と書かれなければならない (対角の添字 S は省いた).

こんどは $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{S}$ であるとしよう. スピン演算子は軌道角運動量と可換であ

り，したがってハミルトニアンと可換であるので，その行列は n, Λ に関して対角的である．したしながらそれは S および Σ（または Ω）に関して対角的ではない．遷移 $S, \Sigma \to S', \Sigma'$ に対する成分 A_ξ, A_η, A_ζ の行列要素は，公式（27.13）で L, M の代りに S, Σ と書いた式によって決定される．ここで xyz 座標系への変換は式（87.2),（87.3）で $K, \Lambda \to J, \Omega$ と置き換えた式によって与えられる．このような方法で例えば次式が得られる：

$$
\begin{aligned}
&\langle J\Omega\|S\|J, \Omega-1\rangle \\
&\quad=\left[\frac{(2J+1)(J+\Omega)(J-\Omega+1)}{4J(J+1)}\right]^{1/2}\langle\Omega|S_\xi+iS_\eta|\Omega-1\rangle \\
&\quad=\left[\frac{(2J+1)(J+\Omega)(J-\Omega+1)(S+\Sigma)(S-\Sigma+1)}{4J(J+1)}\right]^{1/2}
\end{aligned}
$$

(対角の添字 n, S, Λ は省いた).

つぎに両方の状態が b の場合に属し，$\boldsymbol{A}$ が軌道ベクトルであるとしよう．行列要素の計算は二つの段階で行なわれる．最初に $\boldsymbol{S}$ と $\boldsymbol{K}$ の合成を考慮しないで，回転している分子を考察しよう．この場合行列要素は量子数 S に関して対角的であり，(87.2),(87.3）と同じ公式によって決定される．第2段階で角運動量 K は S と合成されて全角運動量 J となり，新しい行列要素への移行は一般公式（109.3）によって行なわれる（これらの公式で j_1, j_2, J の役割を K, S, J が演ずる)．したがって J, K, Λ に関して対角的な行列要素はまず

$$
\begin{aligned}
&\langle n'JK\Lambda\|A\|nJK\Lambda\rangle \\
&\quad=(-1)^{K+J+S+1}(2J+1)\begin{Bmatrix}K & J & S\\ J & K & 1\end{Bmatrix}\langle n'K\Lambda\|A\|nK\Lambda\rangle
\end{aligned}
$$

となり，つぎに§108の第10表（539頁）にある $6j$-記号の値を用いると，(87.2）の既約行列要素は最終的に

$$
\begin{aligned}
&\langle n'JK\Lambda\|A\|nJK\Lambda\rangle \\
&\quad=\Lambda\left[\frac{2J+1}{J(J+1)}\right]^{1/2}\frac{J(J+1)+K(K+1)-S(S+1)}{2K(K+1)}\langle n'\Lambda|A_\zeta|n\Lambda\rangle
\end{aligned}
$$

となる．

一方の状態が a の場合に属し，他方が b の場合に属するような状態間の遷移に対する行列要素の計算は同様に行なわれる．この計算はここでは行なわない．

問　題

1. 一定の双極モーメントをもつ2原子分子に対する項のシュタルク分裂を決定せよ；項は a の場合に属するものとする．

解 電場 $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ の中の双極子 $\boldsymbol{d}$ のエネルギーは $-\boldsymbol{d}\boldsymbol{\mathcal{E}}$ である．対称性を考慮することにより，2原子分子の双極モーメントは分子軸の方向を向いていることは明らかである：$\boldsymbol{d}=d\boldsymbol{n}$ （d は定数）．場の方向を z 軸にとると，摂動演算子は $-dn_z\mathcal{E}$ の形となる．

本文で導かれた公式に従って，n_z の対角行列要素を決定すると，a の場合における準位の分裂は次の式で与えられることがわかる[1]：

$$\Delta E=-\mathcal{E}dM_J\frac{\Omega}{J(J+1)}.$$

2. b の場合に属する項に対して，問題1と同じ計算を行なえ（ここで $\Lambda\neq0$）．

解 同じ方法により，次式を得る：

$$\Delta E=-\mathcal{E}dM_J\Lambda\frac{J(J+1)-S(S+1)+K(K+1)}{2K(K+1)J(J+1)}.$$

3. ${}^1\Sigma$-項に対して，問題2と同じ計算を行なえ．

解 $\Lambda=0$ に対して1次の効果は存在しないので，摂動論の2次近似に進まなければならない．一般公式（38.10）における和に対しては，与えられた電子項の回転成分間の遷移に対応する項のみをとるだけで十分である（他の項では，分母にあるエネルギー差が大きい）．こうして次式を得る：

$$\Delta E=d^2\mathcal{E}^2\left\{\frac{|\langle K\,M_K|n_z|K-1,\ M_K\rangle|^2}{E_K-E_{K-1}}+\frac{|\langle K\,M_K|n_z|K+1,\ M_K\rangle|^2}{E_K-E_{K+1}}\right\}.$$

ここで $E_K=BK(K+1)$ である．簡単な計算の結果，次式を得る：

$$\Delta E=\frac{d^2\mathcal{E}^2}{B}\,\frac{[K(K+1)-3M_K^2]}{2K(K+1)(2K-1)(2K+3)}.$$

§ 88. Λ-2重項

$\Lambda\neq0$ をもつ項の2重縮退（§78）は，実際には近似的なものである．それが起こるのは，いままでのすべての議論で行なってきたように，分子回転の電子状態への影響（およびスピン－軌道相互作用に関する高次近似）を無視する限りにおいてのみである．電子状態と回転との間の相互作用を考慮すると，$\Lambda\neq0$ をもつ項は二つの近接した準位に分裂する．この現象は **Λ-2重項**と呼ば

---

1) ここで，1次のシュタルク効果が存在しないという一般的な主張（§76）に対する矛盾があることに気づくかもしれない．実際にはもちろんこのような矛盾は存在しない．そのわけは，1次のシュタルク効果が存在するのは，この場合 $\Omega\neq0$ をもつ準位の2重縮退によるものであるからである；このため，得られた式が適用できるのは，シュタルク分裂エネルギーがいわゆる Λ-2重項（§88）のエネルギーにくらべて大きいという条件に対してである．

れる (E. Hill, J. H. van Vleck, R. Kronig, 1928).

この効果を定量的に考察するために，ふたたび1重項 ($S=0$) から始めよう．(§82における) 回転準位のエネルギーの計算では，摂動論の1次近似まで進み，演算子

$$B(r)(\hat{\boldsymbol{K}}-\hat{\boldsymbol{L}})^2$$

の対角行列要素（すなわち平均値）を決定した．より高次の近似の計算を行なうには，この演算子のΛに関して非対角な要素を考察しなければならない．演算子 $\hat{\boldsymbol{K}}^2$ および $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ はΛに関して対角的であるので，演算子 $2B\hat{\boldsymbol{K}}\hat{\boldsymbol{L}}$ だけを考察すればよい．

$\hat{\boldsymbol{K}}\hat{\boldsymbol{L}}$ の行列要素を計算するには，公式 (29.12) で $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{K}$, $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{L}$ と置いたものを用いるのが便利である；L, M は K, M_K に置きかえられ，n のかわりに n, Λ と書かなければならない．ここで n は，電子項を決定する（Λを除く）量子数の総体をあらわしている．保存されるベクトル $\boldsymbol{K}$ の行列は n, Λ に関して対角的であり，ベクトル $\boldsymbol{L}$ の行列は Λ が1だけ変化する遷移に対してのみ非対角要素をもつので (§87で任意のベクトル $\boldsymbol{A}$ について述べたことを参照せよ)，式 (87.3) を用いて次式を得る：

$$(n'\Lambda KM_K|\boldsymbol{KL}|n, \Lambda-1, KM_K)$$
$$=\frac{1}{2}\langle n'\Lambda|L_\xi+iL_\eta|n, \Lambda-1\rangle\sqrt{(K+\Lambda)(K+1-\Lambda)}. \quad (88.1)$$

Λのより大きい変化に対応する行列要素は存在しない．

$\Lambda\to\Lambda-1$ の行列要素の摂動効果は，摂動論の 2Λ 次近似においてのみ $\pm\Lambda$ をもつ状態間のエネルギー差の出現をもたらすことができる．したがって，この効果は $B^{2\Lambda}$，すなわち $(m/M)^{2\Lambda}$ に比例する（M は核の質量，m は電子の質量）．$\Lambda>1$ に対してはこの量は十分小さくて，興味がない．このようなわけで Λ-2重項の効果は Π-項 ($\Lambda=1$) に対してのみ重要である．以下にそれを論ずる．

$\Lambda=1$ に対しては2次近似までとらなければならない．エネルギー固有値に対する補正は一般公式 (38.10) により決定できる．この方程式における和の各項の分母は，$E_{n,\Lambda,K}-E_{n',\Lambda-1,K}$ の形をしたエネルギー差である．これらの差において，Kを含む項は互いに消去される．そのわけは，与えられた核間距離

r に対して，回転エネルギーはすべての項に対して同一の値 $B(r)K(K+1)$ であるからである．このため求めている分裂 ΔE の K への依存性は，分子のなかの行列要素の自乗によって完全に決定される．これらの中には，Λ が 1 から 0 へ，また 0 から -1 へと変わる遷移に対する行列要素の自乗がある；これらは (88.1) により，いずれも K への同一の依存性を与える．したがって ${}^1\Pi$-項の分裂は次の形をもつことがわかる：

$$\Delta E = \text{const} \cdot K(K+1). \tag{88.2}$$

そして（大きさの程度については）const$\sim B^2/\varepsilon$ である．ここで ε は隣接する電子項間の差の程度の大きさである．

つぎにゼロでないスピンをもつ項に移ろう（${}^2\Pi$-および ${}^3\Pi$-項；S のより大きい値は実際には見られない）．もしも項が b の場合に属するならば，多重項分裂は一般には，上に示したように式 (88.2) で決定される回転準位の Λ-2 重項にはあらわれない．

ところが a の場合には，スピンの影響は反対に重要である．各電子項はこの場合，量子数 Λ の他に量子数 Ω によっても特徴づけられる．もしも単に Λ を $-\Lambda$ に置きかえると，$\Omega = \Lambda + \Sigma$ も変わり，まったく別の項が得られることになる．Λ, Ω をもつ状態と $-\Lambda, -\Omega$ をもつ状態とは互いに縮退している．この縮退を取り除くには，この場合，上で考察した軌道角運動量と分子の回転との相互作用の影響によるばかりでなく，スピン－軌道相互作用の影響によっても可能である．問題は次の点にある．すなわち全角運動量の分子軸への投影 Ω の保存は，（静止核に対し）厳密な保存則であり，したがってスピン－軌道相互作用によって破ることができない；しかしながらこの相互作用は，Ω を不変のまま，同時に Λ および Σ を変える（すなわち対応する遷移に対する行列要素が存在する）．この効果が，それ自身単独に，あるいは（Σ を変えずに Λ を変える）軌道－回転相互作用と結合して，Λ-2 重項を引き起こすことができる．

最初に項 ${}^2\Pi$ を考察しよう．項 ${}^2\Pi_{1/2}$ ($\Lambda=1$, $\Sigma=-1/2$, $\Omega=1/2$) に対しては，スピン－軌道相互作用および軌道－回転相互作用を（おのおの 1 次近似において）同時に考慮することにより分裂が得られる．実際に，前者は $\Lambda=1$, $\Sigma=-1/2 \to \Lambda=0$, $\Sigma=1/2$ の遷移を与え，その後で後者は $\Lambda=0$, $\Sigma=1/2$ の状態から $\Lambda=-1$, $\Sigma=1/2$ の状態へ移す．その結果，最初に比べて Λ および Ω の符号

が異なる．スピン－軌道相互作用の行列要素は回転量子数Jに依存しないが，軌道－回転相互作用のJへの依存性は，式（88.1）で（根号の中の）KおよびΛをJおよびΩに置きかえたものにより決定される．こうして項${}^2\Pi_{1/2}$のΛ-2重項に対して次式を得る：

$$\Delta E_{1/2}=\text{const}\cdot\left(J+\frac{1}{2}\right). \qquad (88.3)$$

ここでconst$\sim AB/\varepsilon$である．ところが項${}^2\Pi_{3/2}$に対しては，より高次の近似においてのみ分裂が得られるので，実際上は$\Delta E_{3/2}=0$である．

最後に${}^3\Pi$-項を考察しよう．項${}^3\Pi_0(\Lambda=1,\ \Sigma=-1)$では，スピン－軌道相互作用の2次近似まで考慮することにより分裂が得られる（遷移$\Lambda=1,\ \Sigma=-1\to\Lambda=0,\ \Sigma=0\to\Lambda=-1,\ \Sigma=1$のため）．このため，この場合の$\Lambda$-2重項はまったく$J$に依存しない：

$$\Delta E_0=\text{const}. \qquad (88.4)$$

ここでconst$\sim A^2/\varepsilon$である．${}^3\Pi_1$-項に対しては$\Sigma=0$であり，したがってスピンは一般に分裂に対して影響を与えない；このためふたたび（88.2）の形の式でKをJに置きかえたものが得られる：

$$\Delta E_1=\text{const}\cdot J(J+1). \qquad (88.5)$$

ところが項${}^3\Pi_2$に対しては，より高次の近似が要求されるので，$\Delta E_2=0$とみなすことができる．

Λ-2重項の結果として得られる2重項準位の一つはいつも正であり，他は負である；これについてはすでに§86で述べた．分子の波動関数を研究すると，正および負の準位の交代についての規則性を確立することができる．ここではその研究の結果を述べるだけにとどめる[1]．つまり次のことがわかる．もしもJのある値に対して正の準位が負の準位よりも下にあるとすると，$J+1$をもつ2重項においては順序は逆になる——すなわち正の準位は負の準位よりも上にある（以下同様）；全角運動量が逐次値を変えるのに伴って，準位の配置に関する順序は交互に変わる（ここではaの場合の項について述べている；bの場合には角運動量Kの逐次の値に対してまったく同じことが成り立つ）．

1）これはWignerおよびWitmerの論文に与えられている（§80，376頁の脚注参照）．

問　　題

項 $^1\Delta$ に対する Λ–分裂を決定せよ.

解　ここでは摂動論の4次近似において効果があらわれる．その K への依存性は，Λ の変化 $2\to1$，$1\to0$，$0\to-1$，$-1\to-2$ をもつ遷移に対する四つの行列要素 (88.1) についての積により決定される．その結果は

$$\Delta E=\mathrm{const}\cdot(K-1)K(K+1)(K+2).$$

ここで $\mathrm{const}\sim B^4/\varepsilon^3$ である.

§ 89. 遠距離にある原子の相互作用

(原子の大きさに比べて) 互いに遠距離の位置にある2原子を考察し，それらの相互作用エネルギーを決定しよう．いいかえると，大きい核間距離に対する電子項の形を決定する議論を行なおう.

この問題を解くには摂動論を適用し，二つの孤立原子を非摂動系とみなし，それらの電気的相互作用のポテンシャル・エネルギーを摂動演算子とみなすことにする．静電気学から知られているように(第II巻『場の古典論』§ 41，§ 42参照)，互いに遠距離 r の位置にある二つの電荷系の電気的相互作用は $1/r$ のベキで展開することができて，この展開の項は逐次，両電荷系の全電荷，双極モーメント，4重極モーメント等々の相互作用に対応する．中性原子では全電荷はゼロである．展開はまず最初，双極子－双極子相互作用 ($\sim1/r^3$) から始まる；その後に双極子－4重極子項 ($\sim1/r^4$)，4重極子－4重極子 (および双極子－8重極子) 項 ($\sim1/r^5$) 等々がつづく.

まず両原子は S–状態にあると仮定しよう．その場合摂動論の1次近似において原子の相互作用の影響は存在しないことが容易にわかる．実際に，1次近似において相互作用のエネルギーは摂動演算子の対角行列要素として決定され，これは (二つの原子の波動関数の積であらわされる) 系の非摂動波動関数を用いて計算される[1]．しかし S 状態においては，原子の双極モーメント，四重極モーメント等々の対角行列要素すなわち平均値はゼロに等しい．このことは原子中の電荷密度の分布の球対称性から直接導かれる．したがって $1/r$ のベキに関する摂動演算子の展開項のおのおのは，摂動論の1次近似においてゼロを与

1)　この場合，距離とともに指数関数的に減衰する交換効果 (§ 62 の問題1および§ 81 の問題参照) を無視する.

える[1].

2次近似においては摂動演算子における双極相互作用に限るだけで十分である．そのわけは，これは$\boldsymbol{r}$の増大とともにゆっくり減衰する項

$$V=\frac{\boldsymbol{d}_1\boldsymbol{d}_2-3(\boldsymbol{d}_1\boldsymbol{n})(\boldsymbol{d}_2\boldsymbol{n})}{r^3} \tag{89.1}$$

だからである（$\boldsymbol{n}$は両原子間の方向の単位ベクトル）．双極モーメントの非対角行列要素は，一般的にいってゼロではないので，摂動論の2次近似においてゼロでない結果を得る．これはVに関して2次であるので，$1/r^6$に比例する．最低固有値に対する2次近似の補正は，いつも負である（§38）．したがって基底状態にある原子の相互作用エネルギーに対して次の形の式を得る：

$$U(r)=-\frac{\mathrm{const}}{r^6}. \tag{89.2}$$

ここでconstは正の定数である[2]（F. London；1928）.

このようなわけで，互いに遠距離へだたった基底S状態にある2原子は，距離の7乗に反比例した力（$-dU/dr$）で引っぱり合う．遠距離にある原子間の引力はふつう**ファン・デル・ワールス力**と呼ばれる．この力は，安定分子を形成しない原子の電子項のポテンシャル・エネルギー曲線の上にもくぼみをつくる．しかしながらこれらのくぼみは非常に浅く（その深さは電子ボルトの10分の1あるいは100分の1の程度である），その位置は安定分子における原子間距離よりも数倍大きい距離にある．

もしも両原子のうちの一つだけがS状態にあるとすると，それらの相互作用エネルギーに対して（89.2）と同じ結果を得る．そのわけは，1次近似がゼロとなるためには，ただ一つの原子の双極モーメント等々がゼロであれば十分だからである．(89.2)の分子の定数はこの場合両原子の距離に依存するばかりでなく，それらの相互の向きにも，すなわち角運動量の原子を結ぶ軸への投影値

1）このことはもちろん，原子の相互作用エネルギーの平均値が厳密にゼロであることを意味しない．それは距離とともに指数関数的に減衰する，つまり$1/r$のあらゆる有限ベキよりも速く減衰する；したがって展開項のおのおのはゼロとなる．問題は次の点にある．多重極モーメントに関する相互作用演算子の展開それ自身は，両原子の電荷が互いに遠距離rだけ離れているという仮定に基づいている．ところが電子密度の量子力学的分布は遠距離においても（指数関数的に減衰するけれども）有限の値をもつ．

2）（原子単位での）この定数の値は，例えば四つの原子に対して水素6.5，ヘリウム1.5，アルゴン68，クリプトン130である．

Ω にも依存する．

ところが，もしも両原子がゼロでない軌道角運動量および全角運動量をもつならば，事情は変わってくる．双極モーメントに関する限り，その平均値は原子のあらゆる状態においてゼロである（§75）．ところが，（$L \neq 0$, $J \neq 0$, 1/2 をもつ状態において）4重極モーメントの平均値はゼロでない．したがって摂動演算子における4重極－4重極項は，1次近似においてさえゼロでない結果を与える．それゆえ原子の相互作用エネルギーは，距離の6乗ではなく5乗のベキで減衰する：

$$U(r)=\frac{\text{const}}{r^5}. \tag{89.3}$$

ここで定数は正であっても負であってもよい．すなわち引力であることも斥力であることもある．前の場合におけると同様，この定数は両原子の距離に依存するばかりでなく，系の両原子のとる状態にも依存する．

異なる状態にある二つの同種原子の相互作用は，特別の場合となる．非摂動系（二つの孤立した原子）はこの場合，両原子間の状態の互換の可能性に基づく付加的な縮退をもつ．このことにより，1次近似の補正は，摂動の対角要素ばかりでなく非対角要素も含む永年方程式により決定される．もしも両原子の状態が異なる偶奇性をもち，それらの角運動量 L がともにゼロでなくて，そのうえ ±1 または0だけ異なっているとすると（J に対しても同じ条件がつけられる），これらの状態間の遷移に対する双極モーメントの非対角行列要素は，一般的にいってゼロでない．したがって1次近似の効果は，摂動演算子における双極項から得られる．このようなわけで原子の相互作用エネルギーは，この場合 $1/r^3$ に比例する：

$$U(r)=\frac{\text{const}}{r^3}. \tag{89.4}$$

ここで定数は両符号をとることができる．

しかしながらふつう興味があるのは，（与えられた両原子の状態に対して）原子の角運動量のあらゆる可能な方向を含めて，それらの系のあらゆる可能な状態に関して平均された両原子の相互作用である（問題のこのような定式化は，例えばガス中の原子の相互作用の問題にあらわれる）．このような平均化

の結果として，各原子の双極モーメントまたは4重極モーメントに関して1次のあらゆる効果は（すなわち摂動論の1次近似のあらゆる効果は），ゼロとなる．したがって遠距離にある原子間の相互作用の平均化された力は，あらゆる場合に法則（89.2）に従う[1]．

つぎに中性原子とイオンの相互作用に関する類似の問題に移ろう．

摂動論の1次近似では，この相互作用はイオンのクーロン場における四重極エネルギーの演算子（76.8）の平均値によって与えられる．クーロン場のポテンシャルは$\varphi \sim 1/r$であるので，原子とイオンとの相互作用エネルギーは$1/r^3$に比例する．しかしながらこの効果が存在するのは，原子が平均として四重極モーメントをもっているときだけである．ところがその場合でも，原子の角運動量$\boldsymbol{J}$のあらゆる方向について平均すると，この効果は消えてしまう．

$1/r$のベキに関して，いつもゼロとならない次の相互作用は，双極演算子（76.1）に関する摂動論の2次の相互作用である．イオンの場の強さは$\sim 1/r^2$であるので，この相互作用のエネルギーは$1/r^4$に比例する．それは（S-状態における）原子の偏極率αを用いて

$$U = -\frac{\alpha e^2}{2r^4} \tag{89.5}$$

とあらわされる，もしも原子が基底状態にあるならば，このエネルギーは（基底状態のエネルギーに対するあらゆる補正がそうであるように）負である．つまり原子とイオンとの間に引力がはたらく[2]．

問　題

S状態にある二つの同種原子に対して，それらの双極モーメントの行列要素を用いてファン・デル・ワールス力を決定する式を求めよ．

1）非相対論的理論に基づいて得られるこの法則は，電磁気的相互作用の遅延効果が重要でない限りにおいてのみ成り立つ．そのためには原子間距離rがc/ω_{0n}にくらべて小さくなければならない；ここでω_{0n}は原子の基底状態と励起状態の間の遷移振動数である．遅延効果を考慮した原子の相互作用については，第Ⅳ巻『相対論的量子力学』§85を見よ．

2）同様の引力は遠距離にある原子と電子の間にもはたらく．この引力は原子が電子をとりこんで負のイオンを形成する能力の原因である（このときの結合エネルギーは1 eV以下から数eVにわたる）．しかしながらこのような性質をすべての原子が持っているのではない．そのわけは，遠距離で$1/r^4$（または$1/r^3$）で減少する場においては，（電子の束縛状態に対応する）準位の数はどんな場合にも有限であり，特別の場合にはまったくゼロとなるからである．

解　答は摂動論の一般公式 (38.10) を演算子 (89.1) に適用して得られる．S状態にある原子の等方性を考慮すると，あらゆる中間状態に関する和をとると，ベクトル $\boldsymbol{d}_1$ および $\boldsymbol{d}_2$ のおのおのの 3 成分の行列要素の自乗は同一の寄与を与え，また異なる成分の積を含む項はゼロとなることが，あらかじめ明らかである．

その結果次式を得る：

$$U(r)=-\frac{6}{r^6}\sum_{n,n'}\frac{\langle n|d_z|0\rangle^2\langle n'|d_z|0\rangle^2}{E_n+E_{n'}-2E_0}.$$

ここで E_0, E_n は原子の基底状態および励起状態のエネルギーの非摂動値である．仮定により基底状態において $L=0$ であるので，行列要素 $(d_z)_{0n}$ は P-状態 $(L=1)$ への遷移に対してのみゼロでない．公式 (29.7) を用いて $U(r)$ を最終的な形に書くと：

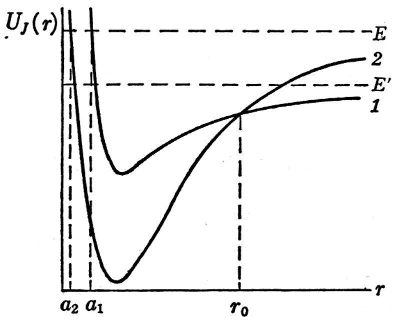
$$U(r)=-\frac{2}{3r^6}\sum_{n,n'}\frac{\langle n1\|d\|00\rangle^2\langle n'1\|d\|00\rangle^2}{E_{n1}+E_{n'1}-2E_{00}}.$$

ここでエネルギー準位および行列要素の添字 nL のうち，第 2 の数は L の値を与え，最初の数はエネルギー準位を決定する残りの量子数の総体をあらわしている．

§ 90. 前 期 解 離

本章に記述された 2 原子分子の理論の基本的な仮定は，分子の波動関数が (パラメーターとしての核間距離に依存した) 電子波動関数と核の運動の波動関数との積に分解されるということである．このような仮定は，分子の厳密なハミルトニアンにおいて核の運動と電子の運動との相互作用に対応する若干の小さい項を無視することと同等である．

これらの項を考慮して，摂動論を適用すると，異なる電子状態間の遷移があらわれる．物理的には，状態間の遷移のうちで，状態の少なくとも一つが連続スペクトルに属する場合がとくに重要である．



第 30 図

第30図には二つの電子項に対するポテンシャル・エネルギー (より厳密には，分子の与えられた回転状態における有効ポテンシャル・エネルギー U_J) 曲線が示されている．エネルギー E' (下の点線) は電子状態 *2* にある安定分子のある振動準位のエネルギーである．状態 *1* においてこのエネルギーは連続スペクトル

の領域に見いだされる．いいかえると，状態 *2* から状態 *1* へ遷移すると分子の自発的な崩壊がおこる；この現象は**前期解離**と呼ばれる[1]．前期解離の結果として，曲線 *2* に対応する離散スペクトルの状態は，実際に有限の寿命をもつ．このことは，離散的エネルギー準位が拡がること，つまりある幅をもつことを意味する（§44 の終り参照）．

ところでもしも全エネルギー E が両状態の解離極限よりも高いと（第30図の上の点線），一つの状態から他の状態への遷移はいわゆる**第2種の衝突**に対応する．したがって，$1\rightarrow 2$ の遷移は，2原子の衝突を意味し，その衝突の結果両原子は励起状態に移り，運動エネルギーを減少させながら飛び去る（$r\rightarrow\infty$ で曲線 *1* は曲線 *2* よりも下に移る；差 $U_2(\infty)-U_1(\infty)$ は両原子の励起エネルギーである）．

核の質量が大きいため，核の運動は準古典的である．したがって考えている遷移の確率を決定する問題は，§52 で論じた種類の問題に属する．そこで述べた一般的考察により，遷移が古典的に可能であるような点が遷移確率に対して決定的な役割を果たすということができる[2]．与えられた遷移に対して，2原子（分子）系の全エネルギーは保存されるので，その《古典的に可能である》という条件は有効ポテンシャル・エネルギーが等しいことを意味する：$U_{J_1}(r)=U_{J_2}(r)$．分子の全角運動量もまた保存されることを考慮すると，両状態における遠心エネルギーは同じである；したがって上の条件はポテンシャル・エネルギーが等しいことに帰着される：

$$U_1(r)=U_2(r). \tag{90.1}$$

ここでは角運動量はまったく含まれない．

もしも方程式 (90.1) が古典的に近づき得る範囲（$E>U_{J_1}$, U_{J_2} である範囲）で実根をもたないならば，§52 により遷移確率は指数関数的に小さい[3]．二つ

1）曲線 *1* は，それが原子間の純粋な斥力に対応する場合には，まったく極小をもたなくてもよい．

2）あるいは，ポテンシャル・エネルギーが無限大となる点 $r=0$ である．

3）原子状態の二つの異なる対からつくられる分子項を考慮した遷移の場合には，特別な事情が起こる（§85 の終り参照）；すなわちポテンシャル・エネルギー曲線が距離の増大とともに，あたかも二つの枝に分裂する場合である．このような事情のもとで遷移確率は非常に大きい；この場合の例は，A. I. Voronin および E. E. Nikitin, Optics and Spectroscopy, **25**, 450 (1969) を見よ．

のポテンシャル・エネルギー曲線が古典的に近づき得る範囲で交差する場合（これは第30図にも示されている）にのみ，かなりの確率で遷移が起こる．このような場合に式（52.1）の中の指数はゼロとなる（したがってもちろんこの式は使えない）．これに応じて遷移確率は指数関数でない式により決定される（以下にそれを求める）．条件（90.1）は，この場合明らかに次のように解釈される．ポテンシャル・エネルギー（および全エネルギー）が同じならば，運動量もまた同じである．したがって（90.1）のかわりに次のように書くことができる：

$$r_1 = r_2, \qquad p_1 = p_2. \tag{90.2}$$

ここで p は核の相対動径運動の運動量，1および2の添字は二つの電子状態をさしている．このようなわけで，遷移の瞬間には核の相互の距離および運動量は不変にとどまるということができる（いわゆる**フランク＝コンドンの原理**）．物理的にはこのことは，電子速度が核速度にくらべて大きく，《電子遷移の起こる間に》核はその位置と速度を認め得るほどに変える間がない，ということに基づいている．

考えている遷移に対する選択規則を確立するのは難しいことではない．まず第1に，二つの明白な厳密な規則がある．遷移に際して全角運動量 J および項の符号（正または負，§86参照）は変わることを許されない．このことは，全角運動量の保存則および座標系の反転に関する波動関数の性質の保存則が任意の（閉じた）粒子系に対して厳密な法則である，ということから直接導かれる．

つぎに，（同種原子からなる分子において）異なる偶奇性の状態間の遷移を禁止する規則がかなり厳密に成り立つ．実際に，状態の偶奇性は核スピンおよび項の符号により一義的に決定される．項の符号の保存則は厳密な法則であるが，核と電子との相互作用は弱いため，核スピンはかなり厳密に保存される．

ポテンシャル・エネルギー曲線の交差点の存在を要求することは，項が異なる対称性をもたなければならないことを意味する（§79参照）．摂動論の1次近似で起こる遷移を考察しよう（より高次の近似で起こる遷移確率は比較的小さい）．前もって気がつくことは，ハミルトニアンの中で考えている遷移を導く項は，準位の Λ-2重項をひき起こすものと同じものであるということである．それらのうちでまず最初にスピン－軌道相互作用を記述する項がある．そ

れは二つの軸性ベクトルの積であらわされる；そのうち一つはスピン性のものであり(つまり電子スピン演算子からなる)，他は座標性のものである；しかしながら，これらのベクトルはけっして単にベクトル $\hat{\boldsymbol{S}}$ および $\hat{\boldsymbol{L}}$ ではないことを強調しておく．したがって，それらがゼロでない行列要素をもつのは，S および Λ が 0，±1 だけ変わる遷移に対してである．

同時に $\Delta S=\Delta\Lambda=0$（そして $\Lambda\neq 0$）である場合は除かれなければならない．そのわけは，この場合遷移に際して項の対称性は一般に変わりようがないからである．二つの Σ-項間の遷移は，もしもそれらのうちの一つが Σ^+-項であり，他が Σ^--項ならば，可能である（軸性ベクトルは Σ^+ および Σ^- の間の遷移に対してのみゼロでない行列要素をもつ．§87 参照)．

ハミルトニアンの中で分子回転と軌道角運動量との相互作用に対応する項は $\hat{\boldsymbol{J}}\hat{\boldsymbol{L}}$ に比例する．それのゼロでない行列要素は，スピン変化を伴わない $\Delta\Lambda=\pm 1$ をもつ遷移に対してである（ベクトルの ζ-成分すなわち L_ζ だけが $\Delta\Lambda=0$ の行列要素をもつ；しかし L_ζ は電子状態に関して対角的である)．

いま考察した項の他に，核の運動エネルギー演算子（すなわち核の座標に関する微分）が核の波動関数に対して作用するだけでなく，パラメーターである r に依存した電子関数に対しても作用することに基づく摂動がなお存在する．ハミルトニアンの中でこれに対応する項は，非摂動ハミルトニアンと同じ対称性をもっている．したがってこれは同じ対称性の電子項間の遷移を導くが，その確率は項の交差が起こらないため無視できる．

遷移確率の具体的な計算に移ろう．問題を明確にするために，第２種の衝突について述べよう．一般公式（43.1）により，求めている確率は次式で決定される：

$$w=\frac{2r}{\hbar}\left|\int\chi^*_{\mathrm{nuc},2}V(r)\chi_{\mathrm{nuc},1}dr\right|^2. \qquad (90.3)$$

ここで $\chi_{\mathrm{nuc}}=r\psi_{\mathrm{nuc}}$（$\psi_{\mathrm{nuc}}$ は核の動径運動の波動関数)，$V(r)$ は摂動エネルギーである（(43.1) における ν の値としてはエネルギー E を選び，それに関する積分を行なうものとする)．最終状態の波動関数 $\chi_{\mathrm{nuc},2}$ はエネルギーの δ-関数によって規格化されなければならない．このように規格化された準古典的関数（47.5）は次の形をもつ：

$$\chi_{\mathrm{nuc},2}=\sqrt{\frac{2}{\pi\hbar v_2}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{a_2}^{r}p_2dr-\frac{\pi}{4}\right) \tag{90.4}$$

(規格化定数は§21の終りに述べた規則により決定される)．これに対し初期状態の波動関数は次の形に書かれる：

$$\chi_{\mathrm{nuc},1}=\frac{2}{\sqrt{v_1}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{a_1}^{r}p_1dr-\frac{\pi}{4}\right). \tag{90.5}$$

これの規格化のしかたは，定常波（90.5）が分解されるべき二つの進行波のおのおのにおいて流れの密度が1になるようにしてある； v_1 および v_2 は核の相対動径運動の速度である．これらの関数を（90.3）に代入すると，無次元の遷移確率 w が得られる．これは核が点 $r=r_0$（準位の交差点）を2度通過するための遷移確率とみなすことができる；波動関数（90.5）はある意味においてこの点を2度通過することに対応していることを考慮しなければならない．そのわけは，この関数は入射進行波と反射進行波をともに含んでいるからである．

関数（90.4),（90.5）を用いて計算される $V(r)$ の行列要素は，被積分関数に余弦の積を含んでおり，これは引数の和および差の余弦に分解することができる．項が交差する点 $r=r_0$ のまわりの積分を行なうと，2番目の余弦のみが重要となるので，次式を得る：

$$w=\frac{4}{\hbar^2}\left|\int\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{a_1}^{r}p_1dr-\frac{1}{\hbar}\int_{a_2}^{r}p_2dr\right)\frac{V(r)dr}{\sqrt{v_1v_2}}\right|^2.$$

この積分は交差点から離れるに従って，急速に収束する．したがって余弦の引数を $\xi=r-r_0$ のベキで展開することができて，$-\infty$ から $+\infty$ までの極限にわたって ξ に関する積分を行なうことができる（ここで余弦のゆっくり変化する係数を $r=r_0$ におけるその値で置きかえる)．交差点では $p_1=p_2$ であることを考慮すると，

$$\int_{a_1}^{r}p_1dr-\int_{a_2}^{r}p_2dr\approx S_0+\frac{1}{2}\left(\frac{dp_1}{dr_0}-\frac{dp_2}{dr_0}\right)\xi^2$$

となる．ここで S_0 は点 $r=r_0$ における積分の差の値である．運動量の微係数は力 $F=-dU/dr$ を用いてあらわすことができる；恒等式 $p_1^2/2\mu+U_1=p_2^2/2\mu+U_2$（$\mu$ は核の換算質量）を微分すると，次式を得る：

$$v_1\frac{dp_1}{dr}-v_2\frac{dp_2}{dr}=F_1-F_2.$$

したがって，

$$\int_{a_1}^{r} p_1 dr - \int_{a_2}^{r} p_2 dr \approx S_0 + \frac{F_1 - F_2}{2v}\xi^2$$

(v は交差点における v_1 と v_2 の共通の値である)．この積分はよく知られた公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \cos(\alpha + \beta\xi^2) d\xi = \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \cos\left(\alpha + \frac{\pi}{4}\right)$$

を用いて行なうことができて，その結果次式を得る：

$$w = \frac{8\pi V^2}{\hbar v |F_2 - F_1|} \cos^2\left(\frac{S_0}{\hbar} + \frac{\pi}{4}\right). \tag{90.6}$$

量 $S_0/\hbar$ は大きく，エネルギー E の変化とともに急速に変化する．したがってエネルギーのせまい範囲で平均するだけで，余弦の自乗はその平均値で置きかえられる．その結果次の式を得る：

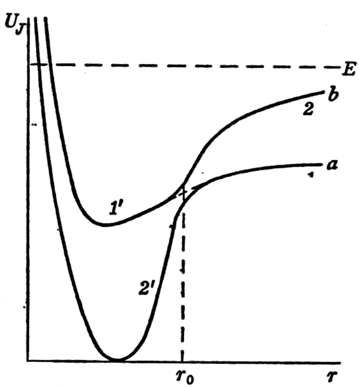
$$w = \frac{4\pi V^2}{\hbar v |F_2 - F_1|} \tag{90.7}$$

(エリ・デ・ランダウ Л. Д. Ландау; 1932)．この式の右辺のすべての量は，ポテンシャル・エネルギー曲線の交差点においてとられるものとする．

前期解離に適用するに当たっては，単位時間に分子が崩壊する確率に興味がある．単位時間に，核はその振動のため $2\cdot\omega/2\pi$ 回，点 $r=r_0$ を通過する．したがって求めている前期解離の確率（2回通過するための確率）は，w に $\omega/2\pi$ を掛けて得られる；すなわちそれは，

$$\frac{2V^2\omega}{\hbar v |F_2 - F_1|} \tag{90.8}$$

となる．



第 31 図

いままで行なわれた計算に関して，次の注意をする必要がある．項の交差について語るとき，われわれは分子の中の電子運動の《非摂動》ハミルトニアン $\hat{H}_0$ の固有値を考えており，考察している遷移をひき起こす項 $\hat{V}$ は考慮に入れていない．もしもこの項をハミルトニアンに含めるならば，項の交差は不可能となり，（第31図に示すように）曲線はわずかに分離する．このこ

とは§79の結果を，別の観点から考察することにより導かれる．

$U_{J1}(r)$ および $U_{J2}(r)$ をハミルトニアン $\hat{H}_0$ の二つの固有値としよう（ここで r はパラメーターとみなされる）．曲線 $U_{J1}(r)$ および $U_{J2}(r)$ の交差点 r_0 に近い範囲で，摂動演算子 $\hat{H}_0+\hat{V}$ の固有値 $U(r)$ を決定するには，§79で与えられた方法を用いなければならない；その結果，次式が得られる：

$$U_{b,a}(r)=\frac{1}{2}(U_{J1}+U_{J2}+V_{11}+V_{22})$$
$$\pm\sqrt{\frac{1}{4}(U_{J1}-U_{J2}+V_{11}-V_{22})^2+|V_{12}|^2}.$$

ここですべての量は r の関数である．（式中の複号の上部の）関数 $U_b(r)$ は第31図の上の連続曲線 (1′2) に対応し，関数 $U_a(r)$ は下の曲線 (2′1) に対応する．行列要素 V_{11} および V_{22} はそれぞれ関数 U_{J1} および U_{J2} の定義に含めることができる．しかし行列要素 V_{12} は単に $V(r)$ であらわされる．すると上の式は次の形に書かれる：

$$U_{b,a}(r)=\frac{1}{2}(U_{J1}+U_{J2})\pm\frac{1}{2}\sqrt{(U_{J1}-U_{J2})^2+4V^2} \qquad (90.9)$$

二つの準位間の間隔は

$$\varDelta U=\sqrt{(U_{J1}-U_{J2})^2+4V^2} \qquad (90.10)$$

となる．したがって，もしも二つの状態間に遷移が存在するならば ($V\neq 0$)，準位の交差は消えてしまう．二つの曲線間の極小距離は $U_{J1}=U_{J2}$ となる点 $r=r_0$ で実現される．その値は

$$(\varDelta U)_{\min}=2|V(r_0)| \qquad (90.11)$$

である．この点の近傍では差 $U_{J1}-U_{J2}$ を微少な差 $\xi=r-r_0$ のベキで展開できて

$$U_{J1}-U_{J2}=U_1-U_2\approx\xi(F_2-F_1)$$

と書ける．ここで $F=-(dV/dr)_{r_0}$ である．すると

$$\varDelta U=\sqrt{(F_2-F_1)^2\xi^2+4V^2(r_0)} \qquad (90.12)$$

を得る．

二つの状態のみを考慮して得られた式 (90.11) および (90.12) が妥当であるためには，他の項への距離にくらべて $(\varDelta U)_{\min}$ が小さいことが必要である．ところが遷移確率に対する式 (90.7) が妥当であるためには，あとで述べるよ

り厳しい条件 (90.19) が満足されるべきである．もしもこの条件が満たされない場合には，今までと同様に二つの項のみを考慮すればよいが，遷移確率を計算するためには一般的な摂動論が適用できない．このような場合にはより一般的な考察が必要となる．

交差点の近傍だけに限定し，核の運動を準古典的に考察すると，系のハミルトニアンにおいて核の速度演算子を定数 v に置き換え，座標 r を古典的方程式 $dr/dt=v$ つまり $\xi=r-r_0=vt$ で決定される時間の関数で置き換えることができる．この結果遷移確率を計算する問題は，時間に陽に依存したハミルトニアンをもつ電子波動関数に対する波動方程式

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=[\hat{H}_0(t)+\hat{V}(t)]\Psi \qquad (90.13)$$

を解く問題に帰着される．ψ_a および ψ_b を曲線 a および b に対応する電子状態の波動関数であるとしよう．それらは方程式

$$(\hat{H}_0+\hat{V})\psi_{a,b}=U_{a,b}(t)\psi_{a,b}$$

の解である．ここで t はパラメーターの役割を演ずる．方程式 (90.13) の解を

$$\Psi=a(t)\psi_a+b(t)\psi_b \qquad (90.14)$$

の形に求めよう．

もしも方程式を $t\to-\infty$ で $a=1$, $b=0$ の境界条件で解くならば，$|b(\infty)|^2$ は核が点 $r=r_0$ を通過するときに分子が状態 ψ_b に移行する——つまり曲線 a から曲線 b への遷移を意味する——確率を与える．同様にして，$|a(\infty)|^2=1-|b(\infty)|^2$ は分子が曲線 a に留まる確率である．（核の接近および後退にともなう）点 r_0 の二重の通過に際して，曲線 a から曲線 b への遷移は，二つの方法で実現される．一つは（接近に際して遷移 $1\to1'$ が起こり，後退に際して分子は曲線 $1'2$ に留まる）$a\to b\to b$ によるか，もう１つは（接近に際して $1\to2'$ が起こり，後退に際して $2'\to2$ となる）$a\to a\to b$ によるかである．したがってこのような遷移の求める確率は

$$w=2|b(\infty)|^2[1-|b(\infty)|^2] \qquad (90.15)$$

である（ここで点 $r=r_0$ を通過する際の遷移確率はもちろん運動の方向に依存しないことを考慮した）．

$b(\infty)$ の値は方程式 (90. 13) を直接用いないで，§ 53 に記述した方法を用いて決めることができる[1].

これを行なうためには，曲線 $U_a(t)$ および $U_b(t)$ が虚点

$$t_0^{(\pm)} = \pm i \frac{2|V|}{|F_2 - F_1| v} \equiv \pm i\tau_0 \qquad (90.16)$$

で交差することに注目する．絶対値が大きく負の値の t に対して (90. 14) の係数 $a(t)$ は《時間に関して準古典的な》形

$$a(t) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} U_a(t)\,dt\right\}$$

をもつ．複素変数 t の平面において左の実の半軸から右の半軸へ，いたるところで《準古典性》の条件が満足される径路を通って動くことにする．$U_a < U_b$ であるので，上の半平面で点 $t_0^{(+)}$ を回って遷移が行なわれなければならない (§ 53 参照)．迂回ののち関数 $a(t)$ は $b(t)$ に移行する．つまり

$$|b(\infty)|^2 = \exp\left\{\frac{2}{\hbar}\,\mathrm{Im}\left[\int_{t_1}^{i\tau_0} U_a(t)\,dt + \int_{i\tau_0}^{t_1} U_b(t)\,dt\right]\right\}$$

$$= \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\,\mathrm{Im}\int_{t_1}^{i\tau_0} \Delta U\,dt\right\}.$$

ここで t_1 としては実軸上の任意の点，例えば $t_1 = 0$ を選ぶことができる．(90. 12) により

$$\Delta U = \sqrt{(F_2 - F_1)^2 v^2 t^2 + 4V^2} \qquad (90.17)$$

であり，($t = i\tau$ と置いて) 求める積分は

$$i\int_0^{\tau_0} \sqrt{4V^2 - (F_2 - F_1)^2 v^2 \tau^2}\,d\tau = i\frac{\pi V^2}{v|F_2 - F_1|}$$

となる．

したがって遷移確率に対する次の表式を最後に得る：

$$w = 2\exp\left(-\frac{2\pi V^2}{\hbar v|F_2 - F_1|}\right)\left[1 - \exp\left(-\frac{2\pi V^2}{\hbar v|F_2 - F_1|}\right)\right] \qquad (90.18)$$

(C. Zener, 1932)．遷移確率は次の二つの極限の場合に小さくなることがわか

---

1) § 53 においては，過程はまったく断熱的であると仮定している．このことはその確率が指数関数的に小さいことに対応している．ところが今の場合にはこの条件は (もしも核の速度 v が十分小さくないと) 点 r_0 のすぐ近傍を核が通過するとき満たされない．しかしながら § 52 および § 53 に記した結論から明らかなように，この方法が適用できるためには，大きい $|t|$ で断熱的であり，系の二つの準位にのみ限定できることが重要である．

る．$V^2 \gg \hbar v|F_2-F_1|$ のとき確率は指数関数的に小さくなり（断熱的の場合），また

$$V^2 \ll \hbar v|F_2-F_1| \tag{90.19}$$

のとき，式 (90.18) は (90.7) となる．(90.17) からわかるように，$\tau \sim |V|/|F_2-F_1|v$ は交差点を通るときの《核の通過時間》である．また $\omega_\tau \sim 1/\tau$ は対応する周波数である．したがって上に述べた二つの極限の場合が実現されるかどうかは，$\hbar\omega_\tau$ と問題の特徴的なエネルギー $|V|$ との関係によって定められる．

最後に，2原子分子のスペクトルにおける摂動と呼ばれる，前期解離に関連した現象を考察しよう．もしも二つの交差する電子項に対応する二つの離散的な分子準位 E_1 および E_2 が互いに接近していると，両電子状態間に遷移の可能性があれば準位の変化が起こる．摂動論の一般公式 (79.4) により，変位した準位に対して次式を得る：

$$\frac{E_1+E_2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E_1-E_2}{2}\right)^2 + |V_{12\mathrm{nuc}}|^2}. \tag{90.20}$$

ここで $V_{12\mathrm{nuc}}$ は分子状態1および2の間の遷移に対する摂動の行列要素である（行列要素 $V_{11\mathrm{nuc}}$ および $V_{22\mathrm{nuc}}$ はもちろん E_1 および E_2 に含まれなければならない）．この式からわかるように，両準位は反対側に離れて移動する（すなわち上の準位は増大し，下の準位は減少する）．差 $|E_1-E_2|$ が小さければ小さいほど，移動の値は大きくなる．

行列要素 $V_{12\mathrm{nuc}}$ は，前に第2種の衝突の確率を決定するときに行なったのとまったく同じようにして計算される．異なるのはただ次のことだけである．すなわち波動関数 $\chi_{\mathrm{nuc},1}$ および $\chi_{\mathrm{nuc},2}$ は離散準位に属し，したがって1に規格化されなければならない．(48.3) によりこれらの関数は次のようになる：

$$\chi_{\mathrm{nuc},1} = \sqrt{\frac{2\omega_1}{\pi v_1}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{a_1}^{r} p_1 dr - \frac{\pi}{4}\right).$$

$\chi_{\mathrm{nuc},2}$ についても同様である．式 (90.3)～(90.5) と比較してわかるように，ここで考察している行列要素 $V_{12\mathrm{nuc}}$ は，交差点を2度通過する遷移確率 w と次の式により関連している：

1) C. Zener. Proc. Roy. Soc., **A 137**, 696 (1932) 参照.

$$|V_{12\mathrm{nuc}}|^2 = w\frac{\hbar\omega_1}{2\pi}\frac{\hbar\omega_2}{2\pi}. \tag{90.21}$$

問　　題

1.　スピン－軌道相互作用による遷移に対して，衝突原子の運動エネルギー E の関数として，第2種の衝突の全断面積を決定せよ（エリ・デ・ランダウ Л. Д. Ландау, 1932).

解　核の運動は準古典的であるため，衝突パラメーター ρ（核間相互作用がない場合に，核が互いにすれちがう距離）の概念を導入することができて，断面積 $d\sigma$ は，衝突面積 $2\pi\rho d\rho$ と1回の衝突あたりの遷移確率 $w(\rho)$ との積として決定することができる（第1巻『力学』，§18 参照）．全有効断面積 σ は ρ に関する積分により得られる．

スピン－軌道相互作用に対して，行列要素 $V(r)$ は衝突原子の角運動量 M に依存しない．両曲線の交差点 $r=r_0$ における速度 v を次の形に書こう：

$$v=\sqrt{\frac{2}{\mu}\left(E-U-\frac{M^2}{2\mu r_0^2}\right)}=\sqrt{\frac{2}{\mu}\left(E-U-\frac{\rho^2 E}{r_0^2}\right)}.$$

ここで U は交差点における U_1 および U_2 の共通の値，μ は両原子の換算質量であり，角運動量 $M=\mu\rho v_\infty$（v_∞ は無限遠における両原子の相対速度）である．エネルギーの原点は，無限遠において初期状態における両原子の相互作用エネルギーがゼロとなるように選ぶことにする；すると $E=\mu v_\infty^2/2$. これを（90.7）に代入すると

$$d\sigma=2\pi\rho d\rho\cdot w=\frac{8\pi^2V^2}{\hbar|F_2-F_1|}\frac{\rho d\rho}{\sqrt{\frac{2}{\mu}\left(E-U-\frac{\rho^2E}{r_0^2}\right)}}$$

が得られる．ρ に関する積分は，ゼロから速度 v がゼロとなる値までの範囲について行なわなければならない．その結果次式を得る：

$$\sigma=\frac{4\sqrt{2\mu}\pi^2V^2r_0^2}{\hbar|F_2-F_1|}\frac{\sqrt{E-U}}{E}.$$

2.　分子の回転と軌道角運動量との相互作用による遷移に対して，上と同じ計算を行なえ（エリ・デ・ランダウ Л. Д. Ландау, 1932).

解　行列要素 V は，$V(r)=MD/\mu r^2$ の形をもつ．ここで $D(r)$ は電子の軌道角運動量の行列要素である．問題1で行なったのと同じ方法により，次式を得る：

$$\sigma=\frac{16\sqrt{2}\pi^2D^2}{3\hbar\mu^{1/2}|F_2-F_1|}\frac{(E-U)^{3/2}}{E}.$$

3.　交差点におけるポテンシャル・エネルギー U_J の値に近いエネルギー E に対する遷移確率を決定せよ．

解　$E-U_J$ の小さい値に対して，公式（90.7）は適用されない．そのわけは交差点の近くで核速度 v は定数でなくなり，したがって（90.7）の導出でなされたように，積分記号の外へ出すことができないからである．

交差点の近くで曲線 U_{J1}, U_{J2} を直線

$$U_{J1}=U_J-F_{J1}\xi,\quad U_{J2}=U_J-F_{J2}\xi,\quad \xi=r-r_0$$

に置きかえよう．この範囲における波動関数 $\chi_{\mathrm{nuc},1}$ および $\chi_{\mathrm{nuc},2}$ は，一様な場における1次元運動の波動関数と一致する（§ 24）．計算は運動量表示における波動関数を用いて行なうのが便利である．エネルギーの δ-関数によって規格化された波動関数は次の形をもつ（§ 24 の問題参照）：

$$a_2=\frac{i}{\sqrt{2\pi\hbar|F_{J2}|}}\exp\left\{\frac{1}{\hbar F_{J2}}\left[(E-U_J)p-\frac{p^3}{6\mu}\right]\right\}.$$

そして入射波および反射波において流れの密度を1として規格化された関数は，$\sqrt{2\pi\hbar}$ を掛けて得られる：

$$a_1=\frac{1}{\sqrt{|F_{J1}|}}\exp\left\{\frac{1}{\hbar F_{J1}}\left[(E-U_J)p-\frac{p^3}{6\mu}\right]\right\}.$$

積分に際して摂動エネルギー（行列要素）V は，ふたたびその交差点における値に置きかえて積分記号の外に出すことができる：

$$w=\frac{2\pi}{\hbar}\left|V\int_{-\infty}^{\infty}a_1a_2^*dp\right|^2.$$

その結果次式を得る：

$$w=\frac{4\pi V^2(2\mu)^{2/3}}{\hbar^{4/3}(F_{J1}\cdot F_{J2})^{1/3}(F_{J2}-F_{J1})^{2/3}}\Phi^2\left[-(E-U_J)\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left(\frac{1}{F_{J2}}-\frac{1}{F_{J1}}\right)^{2/3}\right].$$

ここで $\Phi(\xi)$ はエアリ関数である（数学的補遺§b 参照）．$E-U_J$ が大きいとき，この式は（90.7）に移行する．

4.　水素原子と水素イオン（陽子）とのおそい遠隔衝突（相対速度 $v\ll1$）における電荷交換の確率を決定せよ[1]（オ・ベ・フィルソフ O. Б. Фирсов 1951）．

解　$H+H^+$ の系を水素分子のイオンとみなそう（§81 の問題参照）．電荷交換は，第1の核に局在した状態 ψ_1 から第2の核の近傍の状態 ψ_2 へ電子が遷移することによる．これらの状態はたとえ核が不動であっても，定常状態ではない，定常状態は

$$\psi_{g,u}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1\pm\psi_2)$$

である．それらのエネルギーは核間距離 R の関数としての $U_{g,u}(R)$ である．核が（古典的とみなせる）おそい運動をしているとき，これらのエネルギーは時間とともにゆっくり変化する関数であるが，波動関数の時間依存性は《時間に関する準古典的な》因子

$$\exp\left(-i\int U_{g,u}(t)dt\right)$$

で与えられる（§53 と比較せよ）．$t=-\infty$ で ψ_1 となるような両状態の重ね合せは

$$\Psi=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_g\exp\left(-i\int_{-\infty}^{t}U_gdt\right)+\psi_u\exp\left(-i\int_{-\infty}^{t}U_udt\right)\right]$$

である．$t\to\infty$ でこの関数は，$c_1\psi_1+c_2\psi_2$ の形の線形結合となり，電荷交換の確率は $\omega=|c_2|^2$ である．簡単な計算の結果

1)　この問題では原子単位が用いられている．

$$\omega=\sin^2\eta, \qquad \eta=\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}(U_u-U_g)dt$$

を得る．大きい衝突係数 ρ をもち（また十分小さい速度 v をもつ）衝突では，核の運動は直線的とみなすことができるので，$R=\sqrt{\rho^2+v^2t^2}$ とおける．ところで $R\gg 1$ における差 U_u-U_g は§81の問題の式（4）で与えられる．したがって

$$\eta=\frac{4}{v}\int_{\rho}^{\infty}\frac{R^2e^{-R-1}}{\sqrt{R^2-\rho^2}}dR.$$

$\rho\gg 1$ のとき，積分で重要な R の値の範囲は，下限の近傍である．$R=\rho(1+x)$ と置くと

$$\eta\approx\frac{2\sqrt{2}}{ev}\rho^2e^{-\rho}\int_0^{\infty}\frac{e^{-\rho x}}{\sqrt{x}}dx=\frac{2\sqrt{2\pi}}{ev}\rho^{3/2}e^{-\rho}$$

を得る．

第12章　対称性の理論

§ 91. 対称変換

多原子分子の項の分類は，２原子分子の場合と同様にその対称性と非常に密接な関係がある．そこでわれわれは，分子がもち得る対称の型の研究からはじめよう．

物体の対称性は，物体をそれ自身に重ね合わせるような変位の全体によって定義される．これらの変位のことを**対称変換**という．可能な対称変換はどれも，変換の三つの基本型の中の一つか，あるいはいくつかの組み合わせとしてあらわすことができる．これら三つの本質的に異なる型は，物体のある軸の回りの一定の角度の**回転**，ある平面での**鏡映**，および物体のある距離だけの**平行移動**である．これらの中の最後の型は，明らかに無限媒質（結晶格子）だけに可能である．有限の大きさをもつ物体（とくに分子）は，ただ回転と鏡映に関してのみ対称であり得る．

もしも物体がある軸のまわりを角度 $2\pi/n$ だけ回転するとき自分自身に重なり合うとすれば，このような軸は n **回対称軸**と呼ばれる．数 n は任意の整数 $n=2, 3, \cdots$ をとることができる．そして $n=1$ という値は角度 2π，あるいは同じことだがゼロだけの回転に対応する．こなわち恒等変換に対応する．与えられた軸のまわりの角度 $2\pi/n$ の回転操作を，記号 C_n であらわすことにしよう．この操作を２回，３回，… とくり返して，角度 $2(2\pi/n)$, $3(2\pi/n)$, … の回転が得られる．これもまた物体を自分自身と重ね合わせる．これらの回転は C_n^2, $C_n^3\cdots$，とあらわすことができる．もしも n が p の倍数ならば，明らかに

$$C_n^p=C_{n/p} \tag{91.1}$$

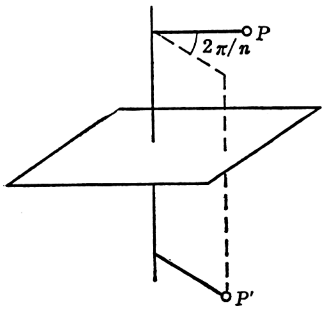
である．とくに，回転を n 回行なうと始めの位置にもどる．すなわち，**恒等変換**を行なったことになる．この恒等変換を E であらわすと，

$$C_n^n=E \tag{91.2}$$

と書くことができる．

もしもある平面に対する鏡映により，物体が自分自身と重なり合うとする．このような平面は**対称面**と呼ばれる．平面での鏡映の操作を，σ という記号であらわそう．一つの平面での鏡映を2回くり返せば，明らかに恒等変換になる：

$$\sigma^2 = E. \tag{91.3}$$



第 32 図

二つの変換——回転と鏡映——を同時に行なういわゆる**回転鏡映軸**が出てくる．物体がある軸の回りを角度 $2\pi/n$ だけ回転し，次にこの軸に垂直な平面で鏡映されるとき（第32図），自分自身と重なり合うとすれば，その物体は n 回回転鏡映軸をもつ．これは n が偶数のときにのみ新しい型の対称性であることが容易にわかる．事実，n が奇数だと，回転鏡映変換を n 回くり返すと，この軸に垂直な平面での単なる鏡映と同じになる（そのわけは，回転角は 2π で，同一平面での奇数回の鏡映は単なる鏡映であるからである）．この変換をさらに n 回くり返すと，回転鏡映軸は，独立な n 回対称軸とそれに垂直な対称面との同時共存に帰着するという結果を得るだろう．もしも n が偶数ならば，回転鏡映変換を n 回くり返すと物体は始めの位置にもどる．

回転鏡映変換は S_n という記号であらわされる．与えられた軸に垂直な平面での鏡映を σ_h であらわすと，定義により

$$S_n = C_n\sigma_h = \sigma_h C_n \tag{91.4}$$

と書くことができる（操作 C_n と σ_h を行なう順序は，もちろん結果には影響がない）．

2回回転鏡映軸は重要な特別な場合である．容易にわかるように，角度 π の回転にその回転軸に垂直な平面での鏡映が伴ったものは，**反転**変換である．このとき物体の点 P は，軸と面の交点 O と P とを結ぶ直線の延長上に，OP と OP' が等しいようにとった別の P' 点に移されることが容易にわかる．この変換に対して対称な物体を対称中心をもつ物体という．反転の操作をわれわれは

I であらわすことにしよう．すなわち，

$$I \equiv S_2 = C_2 \sigma_h \tag{91.5}$$

である．また明らかに，$I\sigma_h = C_2$，$IC_2 = \sigma_h$ である．いいかえれば，2回軸，それに垂直な対称面，それらの交点にある対称中心の三つは互いに独立でない．すなわち，これらの中の任意の二つが存在すると，自動的に第3のものも存在することになる．

ここで，物体の対称性の研究のために有益な，回転および鏡映に固有な純幾何学的性質のいくつかを示そう．

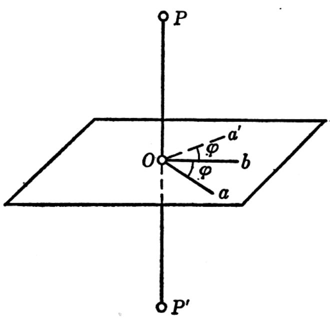
一点で交わる2軸の回りの二つの回転を行なうことは，同じ点を通るある第3の軸の回りの回転になる．互いに交わる平面での二つの鏡映を行なうことは回転と同等である．この回転軸は明らかにこれら平面の交線と一致し，回転角は，簡単な幾何学的作図からすぐわかるように，2平面間の角の2倍に等しい．軸の回りの角度 φ の回転を $C(\varphi)$ であらわし，この軸を通る二つの平面での鏡映を σ_v および σ_v' であらわすと[1]，上述の命題は

$$\sigma_v \sigma_v' = C(2\varphi) \tag{91.6}$$

の形に書ける．ここで φ は2平面間の角である．二つの鏡映を行なう順序はどうでもよいわけではないことを強調しておく必要がある．変換 $\sigma_v\sigma_v'$ は σ_v' 面から σ_v 面の方への回転を与える．因子を置きかえると逆方向の回転を得る．(91.6) の等式に左から σ_v を掛けると

$$\sigma_v' = \sigma_v C(2\varphi) \tag{91.7}$$

を得る．いいかえれば，回転とその軸を通る面での鏡映を行なうことは，その面と回転角の半分に等しい角で交わっている他の面での鏡映と同等である．とくにこれから，2回対称軸と，それを通り互いに垂直な二つの対称面は互いに独立ではないことが導かれる．すなわち，これらの中の二つが存在すると3番目も存在することになる．



第 33 図

1) 添字 v は，ふつう，与えられた軸を通る平面（《鉛直な》平面）での鏡映を，添字 h はこの軸に垂直な平面（《水平な》平面）での鏡映をあらわす．

角度 φ で交わる二つの軸（第33図の Oa および Ob）の回りの角度 π の回転を行なうことは，始めの二つの軸に垂直な軸（第33図の PP'）のまわりの角度 2φ の回転であることを示そう．事実，この変換の結果として得られる変換もまた回転であることはすでにわかっている；始めの（Oa のまわりの）回転によって点 P は P' に移り，つぎの（Ob のまわりの）回転でそれは始めの位置にもどってくる．これは直線 PP' が動かないこと，したがって回転軸であることを意味している．回転角を決めるには，始めの回転で Oa 軸はその場所に止まっていて，つぎの回転で Oa と 2φ の角をなす Oa' の位置に移ることに着目すれば十分である．同様に，二つの変換の順序を交換するとき，反対方向の回転が得られることも証明できる．

二つの続いた変換の結果は，一般にそれが行なわれる順序に依存するが，一連の場合には演算の順序は重要でない．すなわち，変換は可換である．次のような変換に対してはそうなっている：

1）　同一の軸の回りの二つの回転．

2）　互いに垂直な平面による二つの鏡映（これらは平面の交線のまわりの角度 π の回転と同等である）．

3）　互いに垂直な軸のまわりの角度 π の二つの回転（これらは，垂直な第3の軸のまわりの同じ角度の回転と同等である）．

4）　回転とその回転軸に垂直な平面での鏡映．

5）　任意の回転（あるいは任意の鏡映）とその回転軸（あるいは鏡映面）上にある点での反転；これは1と4から導かれる．

§ 92. 変　換　群

与えられた物体の対称変換のすべての集合を，その**対称変換群**，あるいは単に**対称性の群**[1]と呼ぶ．前にわれわれは，これらの変換を物体の幾何学的変位と言ってきた．しかしながら，量子力学に適用するためには，対称変換を，与えられた系のハミルトニアンを不変にするような座標変換と考えた方がつごうがよい．ある回転あるいは鏡映を行なったときに，系が自分自身に重ねられるならば，これに対応する座標変換はそのシュレーディンガー方程式を変えない

1）　置換群を意味する対称群と区別した［訳注］．

ことは明らかである．このようなわけで，与えられたシュレーディンガー方程式が不変であるような変換の群について述べることにしよう[1]．

対称性の群の研究は，**群論**と呼ばれる一般的な数学の方法を使って行なうとつごうがよい．そこで，この群論の基礎を以下に述べる．われわれはまず有限個の相異なる変換を含む群（**有限群**と呼ばれる）を考察しよう．群の成分である各変換を**群の元**と呼ぶ．

対称性の群は次のような明確な性質をもつ．すべての群の構成要素中に恒等変換 E がある（これを**群の単位元**という）．群の元は互いに《掛ける》ことができる．すなわち，二つ（あるいはそれ以上の）変換の積は，それらを続けて行なった結果と考えることにする．群のいかなる二つの元の積も同じ群の元であることは明らかである．元の乗算には結合則 $(AB)C=A(BC)$ が成り立つ；ここで A, B, C は群の元である．しかしながら，交換則は一般には成立しない．すなわち，一般の場合には $AB \neq BA$ である．群のどの元 A にも同じ群の中に $AA^{-1}=E$ になるような**逆元**（逆変換）A^{-1} が存在する． ある場合には， 元がそれ自身の逆元と一致してもよい． とくに，$E^{-1}=E$ である． 互いに逆元になっている A と A^{-1} とは可換である．

二つの元の積 AB の逆元は

$$(AB)^{-1}=B^{-1}A^{-1}$$

に等しい．そして多数の元の積に対しても同様である；これは乗算を行ない結合則を使って容易に証明することができる．

群の元がすべて可換ならば，このような群は**アーベル群**と呼ばれる．いわゆ

1） このような観点から，ここで述べられている回転や鏡映の群だけでなく，シュレーディンガー方程式を不変に保つような他の型の変換をもまた考察することが許される．与えられた系（分子あるいは原子）を構成している同種粒子の座標の交換もまたこれに含まれる．与えられた系で可能なすべての同種粒子の置換の集合をその置換群と呼ぶ（§63 ですでに扱われた）．以下に述べられる群の一般的性質は置換群についても成り立つ．この型の群のさらに立ち入った研究はよそう．

この章でわれわれが使った記号について，次のような注意をする必要がある．対称変換は本来，われわれがこの本全体にわたって考察するような演算子そのものである．したがって，それは山印をつけた記号であらわさなければならないだろう．しかし一般に使われる記法であることを考慮し，またこの章では誤解される心配がないので，この書き方は使わないことにする．まったく同じ理由で，恒等変換の記号として，1 でなく一般に使われている記号 E を用いた．これは他の章の書き方とも一致している．最後にこの章では反転の演算子は，現代の量子力学の文献で使われ，§30 で使われた記号 P の代りに I とした．

る**巡回群**はアーベル群の特別な場合である．巡回群とは，すべての元がその中の一つの元から，つぎつぎとその乗ベキをつくることによって得られる群，すなわち，元

$$A, A^2, A^3, \cdots, A^n=E$$

からできている群と考える．ここで n はある整数である．

$\boldsymbol{G}$ をある一つの群としよう[1]．もしもこの中からそれ自身もまた群を形成する元のある集合 $\boldsymbol{H}$ をとり出すことができれば，この群 $\boldsymbol{H}$ を群 $\boldsymbol{G}$ の**部分群**と呼ぶ．群の同一の元が，その異なる部分群に含まれることもあり得る．

群の任意の元 A をとり，つぎつぎにその乗ベキをつくると，(群の中の元の総数は有限だから) 最後には単位元が得られる．$A^n=E$ になるような最小の数を n とすると，n は**元 A の位数**，元 $A, A^2, \cdots, A^n=E$ の全体は A の**周期**と呼ばれる．周期は $\{A\}$ によってあらわされる；これ自身が群を形成する．すなわちこれはもとの群の部分群であり，この部分群は巡回群である．

群の元の与えられた集合が，その部分群であるかどうかを確かめるためには，そのすべての二つの元を掛け合わせたとき，その同じ集合の中に含まれる元が得られることを示せばよい．事実，すべての元 A とともにすべてのその乗ベキが含まれ，その中には (n を元の位数として) A^{n-1} も含まれる．これは ($A^{n-1}A=A^n=E$ であるから) 逆元の役目をする．もちろん，単位元も含まれている．

群の元の総数を**群の位数**という．部分群の位数はその全体の群の位数の約数であることは容易にわかる．そのためには，群 $\boldsymbol{G}$ の部分群 $\boldsymbol{H}$ を考えよう．そして G_1 を $\boldsymbol{H}$ に属さない群 $\boldsymbol{G}$ のある元としよう．$\boldsymbol{H}$ のすべての元に G_1 を (たとえば右から) 掛けると，元の集合 (あるいはいわゆる複合体) が得られる．これは $\boldsymbol{H}G_1$ とあらわされる．この複合体のすべての元は明らかに群 $\boldsymbol{G}$ に属する．しかしながら，その中のどれ一つとして $\boldsymbol{H}$ には属さない；事実，$\boldsymbol{H}$ に属する何か二つの元 H_a, H_b に対して $H_aG_1=H_b$ ならば，これから $G_1=H_a^{-1}H_b$ となり，すなわち前提に矛盾して G_1 もまた $\boldsymbol{H}$ に属するはずである．同様に，もしも G_2 が $\boldsymbol{H}$ にも $\boldsymbol{H}G_1$ にも属さない群 $\boldsymbol{G}$ の元とすると，複合体 $\boldsymbol{H}G_2$ のすべての元は，$\boldsymbol{H}$ にも $\boldsymbol{H}G_1$ にも属さないことを示すことができる．この過程を

1)　われわれは，群を斜体の太文字の記号であらわすことにする．

続けて，結局，有限群 $\boldsymbol{G}$ のすべての残りの元を尽してしまう．このようにして，すべての元は複合体（$\boldsymbol{G}$ における $\boldsymbol{H}$ の**剰余類**と呼ばれる）

$$\boldsymbol{H}, \boldsymbol{HG}_1, \boldsymbol{HG}_2, \cdots, \boldsymbol{HG}_m$$

に分けられる．このおのおのは h 個の元を含んでいる．ここで h は部分群 $\boldsymbol{H}$ の位数である．これから群 $\boldsymbol{G}$ の位数 g は $g=hm$ に等しいことが結論され，前記の命題は証明された．整数 $m=g/h$ を群 $\boldsymbol{G}$ における部分群 $\boldsymbol{H}$ の示数と呼ぶ．

もしも群の位数が素数ならば，この証明からただちに，このような群は一般に（$\boldsymbol{E}$ および自分自身を除いて）いかなる部分群ももたないことが導かれる．この逆の命題もまた成立する．すなわち，部分群をもたないあらゆる群の位数は必ず素数であり，この群は巡回群でなければならない（そうでない場合には，その群の中には周期が部分群を形成するような元を含んでいるはずである）．

共役元という重要な概念を導入しよう．二つの元 A および B に対して，C もまたこの群の元のとき

$$A=CBC^{-1}$$

が成立するなら，A と B とは互いに共役であるといわれる（この等式に C を右から，C^{-1} を左から掛けると逆の等式 $B=C^{-1}AC$ が得られる）．共役の重要な性質は，A と B とが共役であり，B と C とが共役ならば，A と C とは共役であることである；実際に，$B=P^{-1}AP$, $C=Q^{-1}BQ$（ここで P, Q はその群の元である）から，$C=(PQ)^{-1}A(PQ)$ が出てくる．このために，群の互いに共役な元の集合を問題にすることができる．このような集合は**共役元の類**あるいは単に群の類と呼ばれる．おのおのの類は何かある一つの元 A によって完全に決められる．すなわち，A を与えると GAG^{-1} をつくることによって全類を得る．ここで G は群のすべての元をとるものとする（もちろん，類の各元が何回得られてもよい）．このようにして，全群を類に分けることができる．このときには，もちろん，群のどの元も類の中のどれか一つだけに含まれることができる．群のすべての元に対して $GEG^{-1}=E$ であるから，群の単位元はそれ自身で一つの類を構成する．群がアーベル群ならば，そのどの元に対しても同じことが成立する．なぜかというと，定義によってこの群のすべての元は可換だから，どの元も自分自身とのみ共役であり，したがって自分だけで一つの類を形

成するからである．群の（E とは一致しない）類はけっしてその部分群でないことを強調しておこう．これはその中に単位元を含まないことからも明からである．

同一類のすべての元は同じ位数をもつ．事実，n が元 A の位数とすれば（すなわち，$A^n=E$），それに共役な元 $B=CAC^{-1}$ に対して $(CAC^{-1})^n=CA^nC^{-1}=E$ である．

$\boldsymbol{H}$ を $\boldsymbol{G}$ の部分群とし，G_1 は $\boldsymbol{H}$ には属さない $\boldsymbol{G}$ の元としよう．容易にわかるように，元 $G_1\boldsymbol{H}G_1^{-1}$ の集合は，群として要求されるすべての性質を満足している．すなわち，群 $\boldsymbol{G}$ の部分群である．部分群 $\boldsymbol{H}$ と $G_1\boldsymbol{H}G_1^{-1}$ は共役であるといわれる．ここでは一方のどの元も他方の元の一つと共役である．G_1 にいろいろの値を与えて，一連の共役な部分群を得る．これらは互いに部分的には一致してもよい．$\boldsymbol{H}$ に共役なすべての部分群が，$\boldsymbol{H}$ と一致するということも起こり得る．このような場合，$\boldsymbol{H}$ を群 $\boldsymbol{G}$ の**正規部分群**（または**不変部分群**）と呼ぶ．たとえば，アーベル群のすべての部分群は明らかにその正規部分群である．

n 個の元 $A, A', A'', \cdots$ をもつ群 $\boldsymbol{A}$ と，m 個の元 $B, B', B'', \cdots$ をもつ群 $\boldsymbol{B}$ があるとしよう．そして（E を除く）$\boldsymbol{A}$ のすべての元は $\boldsymbol{B}$ のすべての元と異なり，かつそれと可換としよう．もしも群 $\boldsymbol{A}$ の各元を，群 $\boldsymbol{B}$ の各元に掛けると，nm 個の元の集合を得る．これもまた群を構成する．実際に，この集合のすべての二つの元に対して，$AB\cdot A'B'=AA'\cdot BB'=A''B''$ が成り立つ．すなわち，これもまたこの集合の元である．こうして得られた位数 nm の群は $\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}$ であらわし，群 $\boldsymbol{A}$ および $\boldsymbol{B}$ の**直積**と呼ぶ．

最後に，群の**同型**の概念を導入しよう．同じ位数の二つの群 $\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{B}$ は，もしもそれらの元の間に互いに1対1の対応，すなわち，元 A に元 B が，元 A' に元 B' が対応し，元 $A''=AA'$ には元 $B''=BB'$ が対応するような関係が成り立てば，同型と呼ばれる．このような二つの群では，明らかに，それらの元の具体的な意味は異なっても，抽象的に考えるとまったく同じ性質をもっている．

§ 93. 点　群

有限の大きさをもつ物体（とくに分子）の対称性の群を構成している変換

は，これらの変換の中の任意のものを適用しても，物体の少なくとも一点は動かないままでいるようなものでなければならない．いいかえれば，分子のすべての対称軸，対称面は少なくとも一つの共通の交点をもたなければならない．事実，二つの交わらない軸のまわりの相つぐ回転，あるいは交わらない平面による相つぐ鏡映を行なうと，物体の平行移動になり，物体は明らかに自分自身と重ならない．上述のような性質をもつ対称性の群は**点群**と呼ばれる．

点群の可能な型の組み立てに移る前に，群の元の類への分配が容易に行なえるようにするかんたんな幾何学的方法を述べよう． Oa をある一つの軸とし，群の元 A はこの軸のまわりの定められた角度の回転であるとしよう．さらに G は同じ群の中の変換（回転あるいは鏡映）で，軸 Oa に適用するとそれを Ob に移すものとしよう．元 $B=GAG^{-1}$ は， Ob 軸の回りの，元 A が Oa の回りに回転させるのと同じ角度の回転に対応することを示そう．実際に，軸 Ob それ自身に対する変換 GAG^{-1} の作用を考察しよう． G の逆変換 G^{-1} は軸 Ob を Oa の位置に移す．したがって，つぎの回転 A はそれをそのままの位置にとどめておく．そして最後に G はそれを逆にもとの位置へと移す．このようにして，軸 Ob は結果としてはもとの場所に残っている．すなわち，B はこの軸のまわりの回転である．A と B とは同じ類に属するので，これらの元の位数は同じである．このことは，これらが同じ角度の回転であることを意味している．

このようにしてわれわれは，二つの同じ角度の回転は，もしも群の元の中に，一方の回転軸を他の回転軸に重ねるような変換があれば，同じ類に属するという結果に到達する．まったく同様にして，二つの異なる平面での鏡映は，もしも群のある変換が，一方の平面を他の平面に移すようなときには，同じ類に属することを示すことができる．その方向を互いに重ね合わせることができる対称軸や対称面のことを，**同値である**という．

二つの回転が同一軸の回りで行なわれる場合には，若干の付加的な注意が必要である．n 回対称軸のまわりの回転 C_n^k $(k=1, 2, \cdots, n-1)$ の逆元は，元 $C_n^{-k}=C_n^{n-k}$ である．すなわち，同じ方向の角度 $(n-k)(2\pi/n)$ の回転，あるいは同じことだが反対方向の角度 $2k\pi/n$ の回転である．もしも群の変換の中に，上の n 回対称軸に垂直な軸のまわりの角度 π の回転（このような回転は考えている軸を反対方向に変える）があれば，上に証明した一般法則に従って，回転 C_n^k

と C_n^{-k} とは同じ類に属する．この軸に垂直な平面に対する鏡映 σ_h もまたその方向を逆向きに変える；しかしながら，鏡映は回転の方向も変えることを考慮しなければならない．したがって，σ_h があっても元 C_n^k と C_n^{-k} とを共役にすることにはならない．ところが，軸を通る平面での鏡映 σ_v は，軸の方向を変えないが，回転の向きを変える．したがって，$C_n^{-k}=\sigma_v C_n^k \sigma_v$ であり，このような対称面があれば C_n^k と C_n^{-k} は同じ類に属することになる．もしも同じ軸の回りの，同じ角度の，反対方向の回転が共役ならば，この軸を**二面的**と呼ぶことにしよう．

点群の類の決定はしばしば次の法則によってかんたんになる．$\boldsymbol{G}$ が反転 $\boldsymbol{I}$ を含まないある群とし，$\boldsymbol{C_i}$ を二つの元 $\boldsymbol{I}$ および $\boldsymbol{E}$ からなる群としよう．このとき直積 $\boldsymbol{G}\times\boldsymbol{C_i}$ は $\boldsymbol{G}$ の2倍の元をもつ群である．すなわち，その中の半分は群 $\boldsymbol{G}$ の元と一致し，残りはそれに $\boldsymbol{I}$ を掛けて得られる．$\boldsymbol{I}$ は点群の任意の他の変換と可換なので，群 $\boldsymbol{G}\times\boldsymbol{C_i}$ は $\boldsymbol{G}$ の2倍の類を含むことは明らかである．すなわち，群 $\boldsymbol{G}$ のどの類 $\boldsymbol{A}$ に対しても，群 $\boldsymbol{G}\times\boldsymbol{C_i}$ の中の二つの類 $\boldsymbol{A}$ および $\boldsymbol{AI}$ が対応する．とくに反転 $\boldsymbol{I}$ はそれ自身で類を形成する．

ここですべての可能な点群を列挙しよう．われわれはもっともかんたんなものから始めて，それに新しい対称性の元を加えていくことにより，つくることができる．点群は適当な添字をつけた斜体の太文字であらわすことにしよう．

I. 群 $\boldsymbol{C_n}$

もっとも簡単な対称性の型は $\boldsymbol{n}$ 回対称軸をただ一つだけ含んでいる．群 $\boldsymbol{C_n}$ は $\boldsymbol{n}$ 回対称軸のまわりの回転群である．明らかにこれは巡回群である．その $\boldsymbol{n}$ 個の元のおのおのはそれ自身類を形成している．群 $\boldsymbol{C_1}$ は恒等変換だけを含み，いかなる対称性もないことに相当する．

II. 群 $\boldsymbol{S_{2n}}$

群 $\boldsymbol{S_{2n}}$ は偶数 $2n$ 回の回転鏡映軸の回りの回転群である．これは $2n$ 個の元を含み，もちろん巡回群である．とくに $\boldsymbol{S_2}$ という群は合計二つの元 $\boldsymbol{I}$ および $\boldsymbol{E}$ だけを含んでいる．すなわち，それはまた $\boldsymbol{C_i}$ とも書かれる．もしも群の位数が $2n=4p+2$ の形の数ならば，その元の中に反転が含まれることに注意しよう．つまり，$(S_{4p+2})^{2p+1}=C_2\sigma_h=I$ であることは明らかである．このような群は直積 $\boldsymbol{S_{4p+2}}=\boldsymbol{C_{2p+1}}\times\boldsymbol{C_i}$ の形に書くことができる．そしてこれを $\boldsymbol{C_{2p+1,i}}$ と書

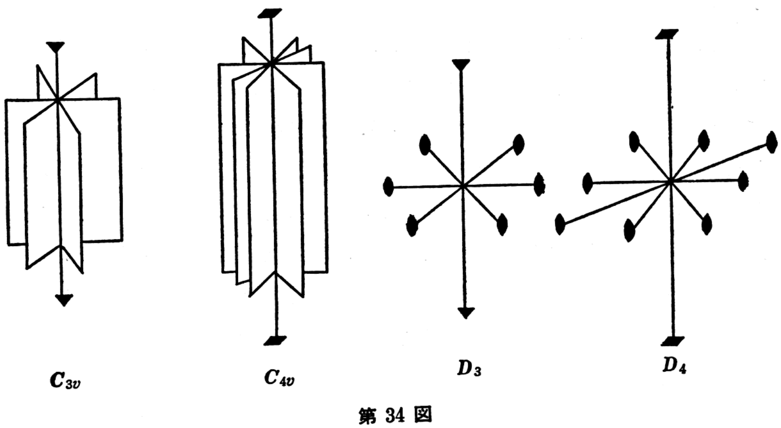
きあらわす.

III. 群 C_{nh}

この群は n 回対称軸に，それに垂直な対称面をつけ加えて得られる．群 C_{nh} は $2n$ 個の元を含んでいる．すなわち，群 C_n の n 個の回転と，n 個の回転鏡映変換 $C_n^k\sigma_h$，$k=1,2,\cdots,n$（この中には鏡映 $C_n^n\sigma_h=\sigma_h$ も含まれる）である．群のすべての元は可換である．すなわちアーベル群である．そこで類の数は元の数に等しい．n が偶数 $(n=2p)$ ならば，群は対称中心をもつ（なぜかというと $C_{2p}^p\sigma_h=C_2\sigma_h=I$ である）．もっとも簡単な群 C_{1h} はただ二つの元，すなわち E および σ_h だけを含む．これはまた C_s によってもあらわされる．

IV. 群 C_{nv}

n 回対称軸に，それを含む対称面をつけ加えると，さらに，互いにこの軸を通って π/n の角度で交わる $n-1$ 個の対称面が自動的に現われることになる（これは幾何学的定理（91.7）からただちに導くことができる[1]）．したがって，ここで得られる群 C_{nv} は $2n$ 個の元を含む．すなわち，n 回軸の回りの n 個の回転と，鉛直面での n 個の鏡映 σ_v である．第 34 図には，例として群 C_{3v} および C_{4v} の対称軸と対称面の組が描かれている．



第 34 図

1) 2π の有理数倍でない角度で交わる二つの対称面は有限群には存在しないことは容易にわかる．このような対称面が二つ存在することから，一つの面についての他の面の鏡映を限りなく行なうことにより，同じ直線で交わっているような無限個の対称面が得られることになる．いいかえれば，このような面が二つ存在することはまた完全な軸対称と同じ結果になる．

類を決定するには，対称軸を通る対称面が存在するので，この軸が二面的であることに注目しよう．各類への元の実際の分配は，偶数および奇数の n ときに異なっている．

n が奇数 $(n=2p+1)$ ならば，次々と行なう回転 C_{2p+1} は，各対称面を次々と残りの $2p$ 個の対称面に重ねる．したがって，すべての対称面は同値であり，これらにより鏡映は一つの類に含まれる．軸のまわりの回転のうちに恒等変換と異なる $2p$ 個の操作があり，これらは対をなして互いに共役であり，二つずつの元 (C_{2p+1}^k と C_{2p+1}^{-k}, $k=1, 2, \cdots, p$) からなる p 個の類を形成する．この他に E は一つの別の類を形成する．このようにして合計 $p+2$ 個の類がある．

これに対して n が偶数 $(n=2p)$ ならば，つぎつぎと行なう回転 C_{2p} によって，一つおきの面だけが重なることができる；二つの相隣りあう面は互いに重ね合わされることができない．このようにして p 個の同値な面の二つの組，すなわちおのおのが p 個ずつの元（鏡映）からなる二つの類が存在する．軸のまわりの回転に関して，$C_{2p}^{2p}=E$ および $C_{2p}^{p}=C_2$ はおのおの自分自身で類をつくり，残りの $2p-2$ 個の回転は対をなして共役で，これがさらに $p-1$ 個の，二つの元からなる類を与える．したがって合計 $p+3$ 個の類がある．

V．群 D_n

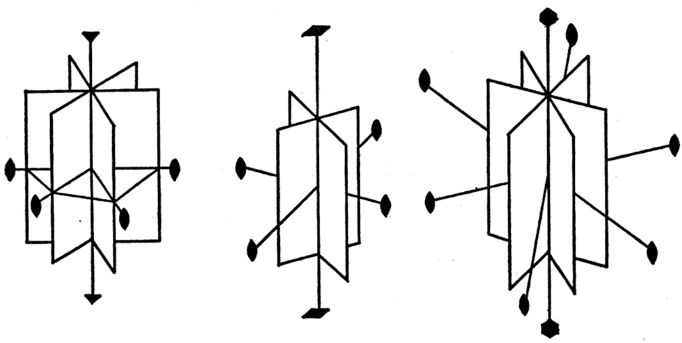
もしも n 回対称軸に，それと垂直な2回軸をつけ加えると，さらに $n-1$ 個のこのような軸が現われ，角度 π/n で交わる水平な2回軸が合計 n 個になる．得られた群 D_n は $2n$ 個の元を含んでいる．すなわち，n 回軸の回りの n 個の回転と，n 個の水平軸の回りの角度 π の回転である（これを U_2 であらわし，鉛直軸の回りの角度 π の回転を C_2 であらわすことは，そのままにしておこう）．第34図には例として群 D_3 および D_4 の対称軸の組が描いてある．

前の場合とまったく同様に，n 回軸は二面的で，水平2回軸は n が奇数なら全部が同値であり，n が偶数ならば二つの同値でない組を形成することがわかる．したがって，群 D_{2p} は次の $p+3$ 個の類をもつ；すなわち，E, おのおの p 個の回転 U_2 からなる二つの類，回転 C_2, 鉛直軸の回りの二つの回転からなる $p-1$ 個の類である．これに対して群 D_{2p+1} は $p+2$ 個の類をもっている：すなわち，E, $2p+1$ 個の回転 U_2 および鉛直軸の回りの二つの回転からなる p 個の類である．

群 D_2 は重要な特別の場合である． この対称軸系は三つの互いに垂直な 2 回軸からなっている．この群はまた V であらわされる．

VI. 群 D_{nh}

群 D_n の対称軸系に，n 個の 2 回軸を含む水平な対称面を一つつけ加えると，自動的に鉛直軸および水平軸の中の一つを含む n 個の鉛直対称面が現われる．ここで得られる群 D_{nh} は $4n$ 個の元を含んでいる；D_n の $2n$ 個の元の他に，その中にはさらに n 個の鏡映 σ_v および n 個の回転鏡映変換 $C_n^k\sigma_h$ が含まれる．第 35 図には群 D_{3h} の対称軸および対称面の組が描かれている．



第 35 図

鏡映 σ_h はこの群の他のすべての元と可換である． したがって，D_{nh} は直積 $D_{nh}=D_n\times C_s$ の形に書くことができる．ここで C_s は E と σ_h の二つの元からなる群である．n が偶数のとき，群の元の中に反転が含まれる．そして，$D_{2p,h}=D_{2p}\times C_i$ と書くこともできる．

これから群 D_{nh} の中の類の数は，群 D_n の中の類の数の 2 倍に等しいという結果が導かれる．その中の半分は群 D_n の類と一致し（軸の回りの回転），残りはそれに σ_h を掛けて得られる． 鉛直面での鏡映 σ_v は （n が奇数ならば） ただ一つの類に含まれるか，あるいは(n が偶数のときには)二つの類を形成する．回転鏡映変換 $\sigma_hC_n^k$ と $\sigma_hC_n^{-k}$ は対をなして互いに共役である．

VII. 群 D_{nd}

群 D_n の対称軸系に対称面をつけ加えるのに，もう一つの方法が可能である．

すなわち，n 回軸を通り，隣りあう 2 本の水平 2 回軸の 2 等分線を通るような鉛直面を加えてもよい．今度もまたこのような対称面を一つつけ加えると，さらに $n-1$ 個の対称面が現われる結果になる．得られた対称軸および対称面の系が群 D_{nd} を定義する（第 35 図には群 D_{2d} および D_{3d} の対称軸および対称面が描かれている）．

群 D_{nd} は $4n$ 個の元を含んでいる．D_n の $2n$ 個の元の他に，鉛直面（σ_d であらわされる《対角》面）での n 個の鏡映および $G=U_2\sigma_d$ の形の n 個の変換がつけ加えられる．後者の性質を明らかにするために，回転 U_2 は（91.6）に従って $U_2=\sigma_h\sigma_v$ の形に書けることに注目しよう．ここで σ_v は与えられた 2 回軸を通る鉛直面での鏡映である．したがって，$G=\sigma_h\sigma_v\sigma_d$ となる（変換 σ_v, σ_h それ自身は，もちろん群の元には含まれない）．σ_v と σ_d の鏡映面は互いに n 回軸で交わり，（ここで隣りあう平面のあいだの角が $\pi/2n$ に等しいので）角度 $(\pi/2n)(2k+1)$ をなしている；ここで $k=1, \cdots, (n-1)$ である．したがって，(91.6)によって $\sigma_v\sigma_d=C_{2n}^{2k+1}$ である．このようにして，$G=\sigma_h C_{2n}^{2k+1}=S_{2n}^{2k+1}$ であること，すなわちこれらの元は鉛直軸のまわりの回転鏡映変換をあらわしており，したがって，単なる n 回対称軸ではなく $2n$ 回の鏡映対称軸であることがわかった．

対角面は二つの隣りあう水平 2 回軸を互いに鏡映しあう．したがって，いま考えている群ではすべての 2 回軸は（n が偶数であろうと，奇数であろうと）同値である．同様にすべての対角面も同値である．回転鏡映変換 S_{2n}^{2k+1} および S_{2n}^{-2k-1} は対をなして互いに共役である[1]．

この考察を群 $D_{2p,d}$ に適用すると，これが次の $2p+3$ 個の類を含むことがわかる：すなわち，E, n 回対称軸のまわりの回転 C_2，同じ軸のまわりの共役な 2 個の回転からなる $p-1$ 個の類，$2p$ 個の回転 U_2 からなる類，$2p$ 個の鏡映 σ_d からなる類，および二つずつの回転鏡映変換からなる p 個の類である．

n が奇数のとき $(n=2p+1)$，群の元の中に反転が含まれ（これはこの場合，水平対称軸の一つが鉛直面に垂直になることからわかる），$D_{2p+1,d}=D_{2p+1}\times C_i$

1）事実

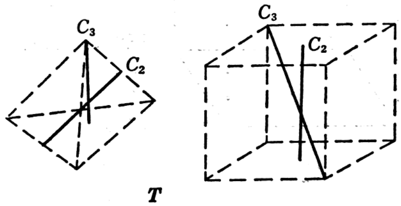
$$\sigma_d S_{2n}^{2k+1}\sigma_d=\sigma_d\sigma_h C_{2n}^{2k+1}\sigma_d=\sigma_h\sigma_d C_{2n}^{2k+1}\sigma_d=\sigma_h C_{2n}^{-2k-1}=S_{2n}^{-2k-1}$$

が成立する．

と書くことができる．したがって，群 $\boldsymbol{D}_{2p+1,d}$ は，群 $\boldsymbol{D}_{2p+1}$ の $p+2$ 個の類から直接求められ，$2p+4$ 個の類を含んでいる．

VIII. 群 $\boldsymbol{T}$（正 4 面体群）

この群の対称軸系は正 4 面体の対称軸系である．これは群 $\boldsymbol{V}$ の対称軸系の他に，四つの斜めの 3 回対称軸をつけ加えることによって得られる．そしてこの軸のまわりの回転により三つの 2 回対称軸が互いに移り合う．この対称軸系は，立方体の向かい合った面の中心を通る三つの 2 回対称軸と，この立方体の空間対角線である四つの 3 回対称軸を描いてあらわすのが便利である．第36図にはこれらの軸が，立方体および正 4 面体の中に（おのおのの型の軸が一つずつ）描かれている．

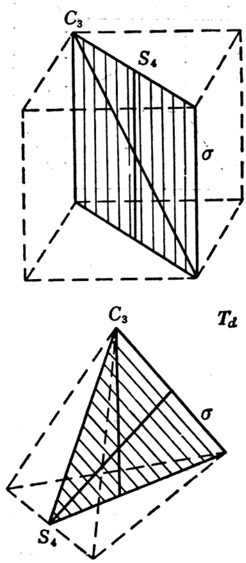


第 36 図

三つの 2 回軸は互いに同値である．3 回対称軸もまた同値であり，したがって，回転 C_2 によって互いに移される；しかしそれらは二面的な軸ではない．これから群 $\boldsymbol{T}$ の12個の元は四つの類に分配されることがわかる：すなわち，E，三つの回転 C_2，四つの回転 C_3 および四つの回転 C_3^2 である．

IX. 群 $\boldsymbol{T}_d$

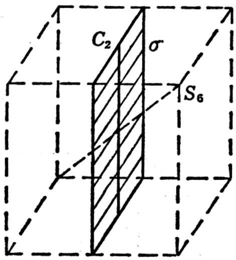
この群は正 4 面体の対称変換をすべて含んでいる．この対称軸および対称面の組は，群 $\boldsymbol{T}$ の対称軸系の他に，おのおのが一つの 2 回軸と二つの 3 回軸を含むような対称面をつけ加えることにより得られる．このとき 2 回軸は 4 回回転鏡映軸となる（群 $\boldsymbol{D}_{2d}$ のときと同様である）．この系は，立方体の向かいあった面の中心を通る三つの回転鏡映軸，その空間対角線である四つの 3 回対称軸，二つの向かいあった稜の対を含む六つの対称面として描くとつごうがよい（第37図には対称軸および対称面の各種類が一つずつ描かれている）．



第 37 図

対称面は 3 回軸に対して鉛直対称面に当たるから，

この軸は二面的な軸である．各種類のすべての対称軸および対称面は同値である．したがって，この群の24個の元は次の五つの類に分配される：すなわち，E，八つの回転 C_3 および C_3^2，対称面による六つの鏡映，六つの回転鏡映変換 S_4 および S_4^3，三つの回転 $C_2=S_4^2$ である．



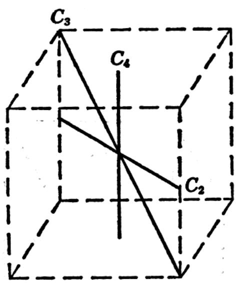
T_h

第 38 図

X. 群 T_h

この群は T に対称中心をつけ加えることによって得られる．すなわち $T_h=T\times C_i$ である．この結果，三つの互いに垂直な，それぞれ二つの2回軸を含む対称面があらわれる．そして3回軸は6回回転鏡映軸となる（第38図には，これらの対称軸および対称面の中の一つずつが描かれている）．

この群は24個の元を含み，これらは群 T の類からただちに求めることができる八つの類に分類される．



O

第 39 図

XI. 群 O（正8面体群）

この群の対称軸系は立方体の対称軸系である：すなわち，向かい合った面の中心を通る三つの4回軸，向かいあった頂点を通る四つの3回軸，および向かいあった稜の中点を結ぶ六つの2回軸である（第39図）．

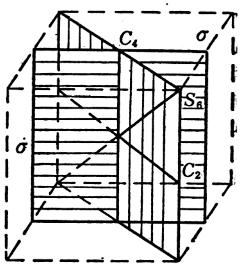
同じ回数の対称軸はすべて同値であり，そのおのおのは二面的であることが容易にわかる．したがって，24個の元は次の五つの類に分けられる：すなわち，E，8個の回転 C_3 および C_3^2，6個の回転 C_4 および C_4^3，3個の回転 C_4^2 および6個の回転 C_2 である．

XII. 群 O_h

これは立方体のすべての対称変換の群である[1]．これは群 O に対称中心をつけ加えることによって得られる．すなわち $O_h=O\times C_i$ である．群 O の3回軸はこのとき6回回転鏡映軸（立方体の空間対角線）となる．この他にも，向かいあう稜の対を含む六つの対称面，および立方体の面に平行な三つの対称面があらわれる（第40図）．この群は48個の元を含み，これらは群 O の類からただ

1）群 T, T_d, T_h, O, O_h はしばしば立方体群と呼ばれる．

ちに得られる10個の類に分配される．すなわち，五つは群 $\boldsymbol{O}$ の類と一致し，残りは，I，8個の回転鏡映変換 S_6 および S_6^5，4回軸のまわりの6個の回転鏡映変換 $C_4\sigma_h$, $C_4^3\sigma_h$，4回軸に対する水平対称面での3個の鏡映 σ_h，これらの軸に対する鉛直対称面での6個の鏡映 σ_v である．



$\boldsymbol{O_h}$

第 40 図

XIII，XIV．**群 $\boldsymbol{Y}$, $\boldsymbol{Y_h}$（正20面体群）**

この群は，分子の対称性の群としては例外的な場合としてのみ自然界に存在するだけである．したがって，われわれはここでは，$\boldsymbol{Y}$ は正20面体（3角形の面をもつ正20面体），あるいは5角正12面体（5角形の面をもつ正12面体）の対称軸のまわりの60個の回転の群であり，そこには6個の5回軸，10個の3回軸，15個の2回軸があることを述べるだけにとどめよう．群 $\boldsymbol{Y_h}$ は対称中心をつけ加えることにより得られる．すなわち，$\boldsymbol{Y_h}=\boldsymbol{Y}\times\boldsymbol{C_i}$ であり，上述の多面体の対称変換の完全な群になっている．

これで有限個数の元を含む点群のすべての可能な型を尽くしたことになる．これに補足して，無限個数の元を含む連続点群と呼ばれるものも考察しなければならない．これは，§98 で行なわれる．

§ 94. 群の表現

ある対称性の群を考えよう．ψ_1 を（与えられた物理系の位相空間で）座標のある一価関数としよう．群の元 G に対応する座標変換で，この関数はある別の関数へ移る．順次に合計 g 個の群の変換（g は群の位数である）を行なって，一般には ψ_1 から g 個の異なる関数を得る．しかしながら，ψ_1 として特定のものを選ぶと，これらの関数中のいくつかは1次従属であることがわかる．その結果われわれは，ある $f(f\leqq g)$ 個の1次独立な関数 $\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_f$ を得る．これらは考えている群に含まれる対称変換によって，互いに1次変換により一方から他方に移される．いいかえれば，変換 G の結果，関数 $\psi_i(i=1, 2, \cdots, f)$ のどれもが

$$\sum_{k=1}^{f} G_{ki}\psi_k$$

の形の1次結合になる．ここで G_{ik} は変換 G に依存する定数である．これらの定数の組を**変換行列**という[1]．

このような関連から，群の元 G を関数 ψ_i に作用する演算子と考えると便利である．したがって，

$$\hat{G}\psi_i=\sum_k G_{ki}\psi_k \tag{94.1}$$

と書くことができる．ここで関数 ψ_i はいつも，互いに規格直交化されているように選ぶことができる．すると，変換行列の概念は，§11 で定義された形の演算子の行列と一致する．すなわち

$$G_{ik}=\int\psi_i^*\hat{G}\psi_k dq \tag{94.2}$$

である．

群の二つの元 G および H の積は，G および H の行列から，ふつうの行列の積の規則（11.12）を使って定義される行列

$$(GH)_{ik}=\sum_l G_{il}H_{lk} \tag{94.3}$$

に対応する．

群のすべての元の行列の集合を群の**表現**と呼ぶ．これらの行列を定義するのに用いられる関数 $\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_f$ を表現の**基底**と呼ぶ．これらの関数の数 f はいわゆる表現の**次元**を与える．

積分 $\int\psi_i^*\psi_k dq$ を考えよう．積分は全空間にわたって行なわれるので，座標系の任意の回転や鏡映でその値は変わらないことは明らかである．言いかえると，対称変換は基底の関数の規格直交性を破らない．そしてこれは演算子 $\hat{G}$ がユニタリーであることを意味する（§12参照）[2]．したがって規格直交基底関数を使った表現で群の元を表現する行列はユニタリである．

関数系 $\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_f$ に対して1次のユニタリ変換

$$\psi_i'=\hat{S}\psi_i \tag{94.4}$$

を行なうと，やはり規格直交の（§12参照）新しい関数系 $\psi_1', \psi_2', \cdots, \psi_f'$ を得

1）関数 ψ_i は1価関数と仮定したので，群のどの元にも一つの確定した行列が対応する．

2）この考察では，積分が（$i\neq k$ のとき）ゼロに等しいか，（$i=k$ のとき）被積分関数が $|\psi_i|^2$ なのでもちろんゼロでないことが重要である．

る[1]. 表現の基底として関数 ψ'_i をとると，同じ次元の新しい表現を得る．その基底関数の1次変換によって互いに導かれるこのような表現は**同値である**といわれる；これらは明らかに，本質的に別のものではない．

同値な表現の行列は互いに簡単な関係式で結ばれる：(12.7) にしたがって，演算子 $\hat{G}$ の行列は新しい表現では，古い表現での演算子

$$\hat{G}' = \hat{S}^{-1}\hat{G}\hat{S} \tag{94.5}$$

の行列に等しい．

群の元 G を表現する行列の対角要素の和（すなわち跡）を，その**指標**と呼ぶ；われわれは指標を $\chi(G)$ であらわそう．同値の表現の行列の指標が一致することは非常に重要である ((12.11) 参照)．この事情により，指標を与えて群表現を記述することが特別の重要性をもつことになる；それは同時に，同値表現と，本質的に異なる表現とを区別することを可能にする．以下われわれは同値でない表現のみを異なる表現ということにしよう．

もしも (94.5) の S を，共役な二つの元 G と G' とを結ぶ群の元と考えると，群のどの表現でも同じ類の元を表現する行列の指標は同じであるという結果に到達する．

群の単位元 E は恒等変換に対応する．したがって，これをあらわす行列はすべての表現で対角的で，その対角要素は1に等しい．したがって，指標 $\chi(E)$ は単に表現の次元に等しい：

$$\chi(E) = f. \tag{94.6}$$

ある次元 f の表現を考えよう．適当な1次変換 (94.4) の結果，基底関数が $f_1, f_2, \cdots$ 個 $(f_1 + f_2 + \cdots = f)$ ずつの組に分かれ，群のあらゆる元の作用で，各組の関数が互いどうしの間だけで変換しあい，他の組の関数にはかかわりないようにすることができる．このような場合，与えられた表現は**可約**という．

これに対してもしも互いに変換しあう基底関数の数が，いかなる1次変換によってもこれ以上小さくすることができないとき，これらの関数からつくられた表現は**既約**と呼ばれる．すべての可約表現は既約表現に分解できるというわけである．これは，適当な1次変換により，基底関数はいくつかの組に分か

1) 変換のユニタリ性から，基底関数の絶対値自乗の和は不変であることを思い起こそう ((12.12) 参照)．

れ，そのおのおのは群の元が作用するときに，何かある既約表現に従って変換されることを意味している．このとき，いくつかの異なる組が同一の既約表現に従って変換されることもあり得る；この場合には，この既約表現は可約表現の中に，それに相当する回数だけ含まれるという．

既約表現は群の重要な特性であり，量子力学へ群論を応用するすべての場合に，基本的な役割をしている．既約表現の基本的な性質を示そう[1]．

群の異なる既約表現の数は群の類の数 r に等しいことを示すことができる．われわれは異なる既約表現の指標を上つき添字で区別することにしよう；異なる表現における元 G の行列の指標は $\chi^{(1)}(G)$，$\chi^{(2)}(G), \cdots, \chi^{(r)}(G)$ となる．

既約表現の行列要素はたくさんの直交関係を満足する．まず最初に，二つの相異なる既約表現に対しては関係式

$$\sum_G G_{ik}^{(\alpha)} G_{lm}^{(\beta)*}=0 \tag{94.7}$$

が成り立つ．ここで $\alpha \neq \beta$ は二つの既約表現を区別し，和は群のすべての元について行なわれるものとする．ところが各既約表現に対しては関係式

$$\sum_G G_{ik}^{(\alpha)} G_{lm}^{(\alpha)*}=\frac{g}{f_\alpha}\delta_{il}\delta_{km} \tag{94.8}$$

が成り立つ．すなわち，行列要素の絶対値の自乗の和

$$\sum_G |G_{ik}^{(\alpha)}|^2=\frac{g}{f_\alpha}$$

だけが0でない．関係式 (94.7)，(94.8) はひとまとめにして

$$\sum_G G_{ik}^{(\alpha)} G_{lm}^{(\beta)*}=\frac{g}{f_\alpha}\delta_{\alpha\beta}\delta_{il}\delta_{km} \tag{94.9}$$

の形に書くことができる．

とくに，これから表現の指標に対する重要な直交関係が得られる．すなわち，等式 (94.9) の両方で添字対 i, k および l, m について和をとると

$$\sum_G \chi^{(\alpha)}(G)\chi^{(\beta)}(G)^*=g\delta_{\alpha\beta} \tag{94.10}$$

を得る．$\alpha=\beta$ のときは

$$\sum_G |\chi^{(\alpha)}(G)|^2=g$$

が成り立つ．すなわち，既約表現の指標の絶対値の自乗の和は群の位数に等し

1) これらの性質の証明は，群論の専門書にある．

い．この関係は表現の既約性の規準に使用できることに注目すべきである．すなわち，可約表現に対して，この和はすべての場合に g よりも大きい（もしも表現が互いにすべて異なる n 個の部分を含むならば，その数は ng に等しい）．

(94.10) から，また二つの既約表現の指標が等しいということは，それらの表現が同値であるための必要条件であるばかりでなく，十分条件でもあることが導かれる．

一つの類の元の指標は同じであるから，和 (94.10) の中には，実際には合計 r 個の独立な項があり，

$$\sum_C g_C \chi^{(\alpha)}(C)\chi^{(\beta)}(C)^* = g\delta_{\alpha\beta} \tag{94.11}$$

の形に書くことができる．ここで和は群の r 個の類（記号 C であらわすことになる）について行なわれ，g_C は類 C 中の元の数である．

既約表現の数は類の数と一致するので，量 $f_{\alpha C}=\sqrt{g_C/g}\chi^{(\alpha)}(C)$ は r^2 個の量の正方行列を形成する．

第一の添字についての直交関係 $(\sum_C f_{\alpha C}f^*_{\beta C}=\delta_{\alpha\beta})$ から，自動的に第二の添字についての直交関係が出る：すなわち，$\sum_\alpha f_{\alpha C}f^*_{\alpha C'}=\delta_{CC'}$．したがって，(94.11) とともに公式

$$\sum_\alpha \chi^{(\alpha)}(C)\chi^{(\alpha)}(C')^* = \frac{g}{g_C}\delta_{CC'} \tag{94.12}$$

が成り立つ．

群のすべての既約表現の中に，いつも，群のすべての変換に関して不変な一つの基底関数からつくられる無意味な表現がある．この1次元表現は**恒等表現**と呼ばれ，その指標はすべて1である．もしも直交性関係式 (94.10) あるいは (94.11) で表現の一つが恒等表現であれば，他に対して

$$\sum_G \chi^{(\alpha)}(G) = \sum_C g_C\chi^{(\alpha)}(C) = 0 \tag{94.13}$$

が成り立つ．すなわち，恒等表現でない表現に対して群のすべての元の指標の和はゼロに等しい*)．

関係式 (94.10) は，それらの指標が知れていれば，すべての可約表現を既約表現へ分解することを非常に容易にしている．

---

*) (94.10)-(94.13) に示される指標に関する総和則は，§95 における点群の既約表現の指標（第7表）によって確かめるとよい．（訳者）

次元 f のある可約表現の指標を $\chi(G)$ としよう．そして $a^{(1)}, a^{(2)}, \cdots, a^{(r)}$ という数を，対応する既約表現がその中に何回含まれているかをあらわすもの，すなわち

$$\sum_{\beta=1}^{r} a^{(\beta)} f_\beta = f \tag{94.14}$$

であるとしよう（f_β は既約表現の次元である）．このとき指標 $\chi(G)$ は

$$\chi(G) = \sum_{\beta=1}^{r} a^{(\beta)} \chi^{(\beta)}(G) \tag{94.15}$$

の形に書ける．この等式に $\chi^{(\alpha)}(G)^*$ を掛け，すべての G について加えると，(94.10) により次式を得る：

$$a^{(\alpha)} = \frac{1}{g} \sum_G \chi(G) \chi^{(\alpha)}(G)^*. \tag{94.16}$$

g 個の関数 $\hat{G}\psi$ によってつくられる次元 $f=g$ の表現を考えよう；ここで ψ は座標のある一般形の関数である（したがって，これから得られる g 個の関数 $\hat{G}\psi$ はすべて1次独立である）．このような表現は**正則表現**であるといわれる．この表現の全行列は，単位元に対応する行列だけを例外として，まったく対角要素をもたないことは明らかである；したがって，$G \neq E$ ならば $\chi(G)=0$ であり，$\chi(E)=g$ である．この表現を既約表現に分解し，(94.16) に従って $a^{(\alpha)}$ という数に対して，$a^{(\alpha)}=(1/g) g f_\alpha = f_\alpha$ という値を得る．すなわち，どの既約表現も考えている可約表現の中に，その次元に等しい数だけ含まれている．これを (94.14) に代入して関係式

$$f_1^2 + f_2^2 + \cdots + f_r^2 = g \tag{94.17}$$

を得る．すなわち，群の既約表現の次元の自乗の和はその位数に等しい[1]．これからとくに，アーベル群（ここでは $r=g$）ではすべての既約表現は1次元である（$f_1 = f_2 = \cdots = f_r = 1$）という結果が出る．

また証明はしないが，群の既約表現の次元数は，群の位数の約数であることを指摘しておこう．

正則表現の既約部分への実際の分解は公式

$$\psi_i^{(\alpha)} = \frac{f_\alpha}{g} \sum_G G_{ik}^{(\alpha)*} \hat{G}\psi \tag{94.18}$$

1) 点群に対して，r および g が与えられたとき，方程式 (94.17) は実際上ただ一つの整数の組 $f_1, f_2, \cdots, f_r$ によってのみ満足されることに注意せよ．

を使って行なわれる．k が与えられたときにこの公式で定義される関数 $\psi_i^{(\alpha)}$ $(i=1, 2, \cdots, f_\alpha)$ は，公式

$$\hat{G}\psi_i^{(\alpha)}=\sum_l G_{li}^{(\alpha)}\psi_l^{(\alpha)}$$

によって互いに変換される．すなわち $\psi_i^{(\alpha)}$ は α-次の既約表現の基底である．k に異なる値を与えることにより，同一の既約表現に対する基底関数 $\psi_i^{(\alpha)}$ の f_α 個の異なる組が得られる．これは，各既約表現が正則表現中に f_α 回現われることに対応している．

任意関数 ψ は群の既約表現に従って変換される関数の和の形であらわすことができる．この問題は次式のように解かれる：

$$\psi=\sum_\alpha\sum_i \psi_i^{(\alpha)}, \qquad \psi_i^{(\alpha)}=\frac{f_\alpha}{g}\sum_G G_{ii}^{(\alpha)*}\hat{G}\psi \tag{94.19}$$

証明のために，第二式を第一式に代入し，i についての和をとると

$$\psi=\frac{1}{g}\sum_G\sum_\alpha f_\alpha\chi^{(\alpha)*}(G)\hat{G}\psi \tag{94.20}$$

を得る．次元 f_α は群の単位元の指標 $\chi^{(\alpha)}(E)$ と一致することに注意し，規格直交関係（94.12）を使うと，和 $\sum_\alpha f_\alpha\chi^{(\alpha)*}(G)$ は G が群の単位元であるときに限りゼロと異なる（g に等しい）ことがわかる．したがって，(94.20) の右辺は ψ と恒等的に一致する．

群の二つの既約表現をつくる二つの異なる関数系 $\psi_1^{(\alpha)}, \cdots, \psi_{f_\alpha}^{(\alpha)}$，および $\psi_1^{(\beta)}, \cdots, \psi_{f_\beta}^{(\beta)}$ を考えよう．積 $\psi_i^{(\alpha)}\psi_k^{(\beta)}$ をつくると，$f_\alpha f_\beta$ 個の新しい関数系を得る．これは次元が $f_\alpha f_\beta$ であるような新しい表現の基底の役割を果たすことができる．この表現は始めの二つの表現の**直積**（あるいは**交差積**）と呼ばれる．これは f_α か f_β の少なくとも一つが 1 に等しいときだけ既約である．直積の指標は二つの成分表現の指標の積に等しいことはすぐにわかる．すなわち，もしも

$$\hat{G}\psi_i^{(\alpha)}=\sum_l G_{li}^{(\alpha)}\psi_l^{(\alpha)}, \qquad \hat{G}\psi_k^{(\beta)}=\sum_m G_{mk}^{(\beta)}\psi_m^{(\beta)}$$

とすれば，

$$\hat{G}\psi_i^{(\alpha)}\psi_k^{(\beta)}=\sum_{l,m} G_{li}^{(\alpha)}G_{mk}^{(\beta)}\psi_l^{(\alpha)}\psi_m^{(\beta)}$$

である．これから，この表現の指標を $(\chi^{(\alpha)}\times\chi^{(\beta)})(G)$ であらわすと

$$(\chi^{(\alpha)}\times\chi^{(\beta)})(G)=\sum_{i,k} G_{ii}^{(\alpha)}G_{kk}^{(\beta)}=\sum_i G_{ii}^{(\alpha)}\sum_k G_{kk}^{(\beta)},$$

すなわち

$$(\chi^{(\alpha)}\times\chi^{(\beta)})(G)=\chi^{(\alpha)}(G)\chi^{(\beta)}(G) \tag{94.21}$$

を得る.

特別の場合には，掛けられる二つの既約表現は一致してもよい．この場合はまったく同じ表現をつくる二つの異なる関数系 $\psi_1, \cdots, \psi_f$ および $\varphi_1, \cdots, \varphi_f$ がある．表現の自分自身との直積は，f^2 個の関数 $\psi_i\varphi_k$ によってつくられ，指標

$$(\chi\times\chi)(G)=[\chi(G)]^2$$

をもつ．この可約表現は，ただちに次元の小さい（しかし一般にはまだ可約である）二つの表現に分けることができる．これらの中の一つは $f(f+1)/2$ 個の関数 $\psi_i\varphi_k+\psi_k\varphi_i$ によってつくられ，他は $f(f-1)/2$ 個の関数 $\psi_i\varphi_k-\psi_k\varphi_i$, $(i\neq k)$ によってつくられる（これらの組のおのおのの関数は，自分達どうしの間でのみ変換されることは明らかである）．前者は，表現のそれ自身との**対称積**と呼ばれ（この指標は記号 $[\chi^2](G)$ であらわされる），また後者は**反対称積**と呼ばれる（この指標は記号 $\{\chi^2\}(G)$ であらわされる）．

対称積の指標を決めるために

$$\hat{G}(\psi_i\varphi_k+\psi_k\varphi_i)=\sum_{l,m}G_{li}G_{mk}(\psi_l\varphi_m+\psi_m\varphi_l)$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{l,m}(G_{li}G_{mk}+G_{mi}G_{lk})(\psi_l\varphi_m+\psi_m\varphi_l)$$

と書こう．これから指標として

$$[\chi^2](G)=\frac{1}{2}\sum_{i,k}(G_{ii}G_{kk}+G_{ik}G_{ki})$$

を得る．ところが

$$\sum_i G_{ii}=\chi(G), \qquad \sum_{i,k}G_{ik}G_{ki}=\chi(G^2)$$

である；こうして最終的に公式

$$[\chi^2](G)=\frac{1}{2}\{[\chi(G)]^2+\chi(G^2)\} \tag{94.22}$$

を得る．これによって，もとの表現の指標を使って表現のそれ自身との対称積の指標を決めることができる．まったく同様にして反対称積の指標に対して，公式

$$\{\chi^2\}(G)=\frac{1}{2}\{[\chi(G)]^2-\chi(G^2)\} \tag{94.23}$$

を得る[1]．

もしも関数 ψ_i と φ_i とが一致すれば，それを使って自乗 ψ_i^2 と積 $\psi_i\psi_k$ $(i \neq k)$ によってつくられる対称積だけを定義し得ることは明らかである．応用に当たっては，もっと高次の対称積に出会うことになる．そしてその指標も同様に求められる．

将来重要になる直積の性質を指摘しよう．二つの異なる既約表現の直積の，既約表現への分解は，掛けられる表現がその複素共役のときにだけその中に恒等表現を（ただ1回だけ）含んでいる．実数表現の場合には，恒等表現は既約表現の自分自身との直積（このとき，明らかにそのまま対称部分に）にのみ含まれる．実際に，表現 (94.21) の中に恒等表現が含まれるかどうかを知るためには，((94.16) に従って) 単にその指標を G について加え（その結果を群の位数 g で割り）さえすればよい．上記の命題は直交関係 (94.10) からただちに出てくる．

最後に，二つの別の群の直積である群（同一の群の二つの表現の直積と混同してはいけない！）の既約表現について二，三の注意をしよう．もしも関数 $\psi_i^{(\alpha)}$ が群 $\boldsymbol{A}$ の既約表現をつくり，関数 $\psi_k^{(\beta)}$ が同様に群 $\boldsymbol{B}$ の既約表現をつくれば，$\psi_k^{(\beta)}\psi_i^{(\alpha)}$ は群 $\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}$ の $f_\alpha f_\beta$-次元の表現の基底であり，ここでこの表現は既約である．この表現の指標は，これに対応したもとの表現の指標を掛けることによって得られる（公式 (94.21) の導き方参照）；群 $\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}$ の元 $C=AB$ には指標

$$\chi(C)=\chi^{(\alpha)}(A)\chi^{(\beta)}(B) \tag{94.24}$$

が対応する．このように群 $\boldsymbol{A}$ および $\boldsymbol{B}$ のすべての既約表現を掛け合わせて，群 $\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}$ のすべての既約表現を得る．

§ 95. 点群の既約表現

今度は点群の中の物理的に重要なものの既約表現の具体的な決定に移ろう．非常にたくさんの分子は，2回，3回，4回および6回対称軸だけをもっている．したがって，20面体群 $\boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Y}_h$ を考える必要はない；群 $\boldsymbol{C}_n$, $\boldsymbol{C}_{nh}$, $\boldsymbol{C}_{nv}$, $\boldsymbol{D}_n$,

1) 2次元の表現に対して，指標 $\{\chi^2\}(G)$ は1次変換 G の行列式と一致することに気づくとよい．これは直接の計算で確かめられる．

第 7 表　点群の既約表現の指標

C_i			E	I
	C_2		E	C_2
		C_s	E	σ
A_g	A ; z	A' ; $x; y$	1	1
A_u ; $x; y; z$	B ; $x; y$	A'' ; z	1	-1

C_3	E	C_3	C_3^2
A ; z	1	1	1
E ; $x \pm iy$	1	ε	ε^2
	1	ε^2	ε

C_{2h}			E	C_2	σ_h	I
	C_{2v}		E	C_2	σ_v	σ_v'
		D_2	E	C_2^z	C_2^y	C_2^x
A_g	A_1 ; z	A	1	1	1	1
B_g	B_2 ; y	B_3 ; x	1	-1	-1	1
A_u ; z	A_2	B_1 ; z	1	1	-1	-1
B_u ; $x; y$	B_1 ; x	B_2 ; y	1	-1	1	-1

C_{3v}		E	$2C_3$	$3\sigma_v$
	D_3	E	$2C_3$	$3U_2$
A_1 ; z	A_1	1	1	1
A_2	A_2 ; z	1	1	-1
E ; x, y	E ; x, y	2	-1	0

C_4		E	C_4	C_2	C_4^3
	S_4	E	S_4	C_2	S_4^3
A ; z	A	1	1	1	1
B	B ; z	1	-1	1	-1
E ; $x \pm iy$	E ; $x \pm iy$	1	i	-1	$-i$
		1	$-i$	-1	i

C_6	E	C_6	C_3	C_2	C_3^2	C_6^5
A ; z	1	1	1	1	1	1
B	1	-1	1	-1	1	-1
E_1	1	ω^2	$-\omega$	1	ω^2	$-\omega$
	1	$-\omega$	ω^2	1	$-\omega$	ω^2
E_2 ; $x \pm iy$	1	ω	ω^2	-1	$-\omega$	$-\omega^2$
	1	$-\omega^2$	$-\omega$	-1	ω^2	ω

C_{4v}			E	C_2	$2C_4$	$2\sigma_v$	$2\sigma_v'$
	D_4		E	C_2	$2C_4$	$2U_2$	$2U_2'$
		D_{2d}	E	C_2	$2S_4$	$2U_2$	$2\sigma_d$
A_1 ; z	A_1	A_1	1	1	1	1	1
A_2	A_2 ; z	A_2	1	1	1	-1	-1
B_1	B_1	B_1	1	1	-1	1	-1
B_2	B_2	B_2 ; z	1	1	-1	-1	1
E ; x, y	E ; x, y	E ; x, y	2	-2	0	0	0

$\boldsymbol{D}_6$	$\boldsymbol{C}_{6v}$	$\boldsymbol{D}_{3h}$	E E E	C_2 C_2 σ_h	$2C_3$ $2C_3$ $2C_3$	$2C_6$ $2C_6$ $2S_3$	$3U_2$ $3\sigma_v$ $3U_2$	$3U_2'$ $3\sigma_v'$ $3\sigma_v$
A_1	A_1; z	A_1'	1	1	1	1	1	1
A_2; z	A_2	A_2'	1	1	1	1	-1	-1
B_1	B_2	A_1''	1	-1	1	-1	1	-1
B_2	B_1	A_2''; z	1	-1	1	-1	-1	1
E_2	E_2	E'; x, y	2	2	-1	-1	0	0
E_1; x, y	E_1; x, y	E''	2	-2	-1	1	0	0

$\boldsymbol{T}$	E	$3C_2$	$4C_3$	$4C_3^2$
A	1	1	1	1
E	1	1	ε	ε^2
	1	1	ε^2	ε
F; x, y, z	3	-1	0	0

$\boldsymbol{O}$	$\boldsymbol{T}_d$	E E	$8C_3$ $8C_3$	$3C_2$ $3C_2$	$6C_2$ $6\sigma_d$	$6C_4$ $6S_4$
A_1	A_1	1	1	1	1	1
A_2	A_2	1	1	1	-1	-1
E	E	2	-1	2	0	0
F_2	F_2; x, y, z	3	0	-1	1	-1
F_1; x, y, z	F_1	3	0	-1	-1	1

$\boldsymbol{D}_{nh}$ は $n=1, 2, 3, 4, 6$ の値をもつものだけを，そして群 $\boldsymbol{S}_{2n}$, $\boldsymbol{D}_{nd}$ は $n=1, 2, 3$ のものだけを考えよう．

これらの群の表現の指標は第 7 表に与えられている．同型の群はもちろん同じ既約表現をもち，同じ表の中にいっしょに与えられている．第 1 行の群の元の記号の前の数は対応する類の元の数を示している（§93 参照）．第 1 列には習慣上用いられる表現の記号が示されている． 1 次元表現は文字 A, B, 2 次元表現は文字 E, 3 次元表現は F であらわされる（2 次元既約表現に対する記号 E を，群の単位元に対する記号 E と混同しないこと！)[1]．n 回主軸のまわりの回転に対し，表現 A の基底関数は対称，B の関数は反対称である．鏡映 σ_h に関する対称性を異にする関数は(一つあるいは二つの)ダッシュの数で区別される．添字 g および u は反転に対する対称性を示している．表現の記号といっしょに，座標自身がどの表現と同様に変換されるかに従って，x, y, z という文字が示されている；ここで z 軸はいつも対称主軸の方向に選ばれる．ε および ω

1) 二つの複素共役な 1 次元表現が，一つの 2 次元表現としてあらわされる理由は，§96 で明らかにされる．

という文字は

$$\varepsilon = e^{2\pi i/3},\quad \omega = e^{2\pi i/6} = -\omega^4,\quad \varepsilon + \varepsilon^2 = -1,\quad \omega^2 - \omega = -1$$

をあらわしている.

巡回群（群 C_n, S_n）に対する既約表現の決定はもっとも簡単である．巡回群はすべてのアーベル群と同様に1次元表現だけをもっている．G を群の生成元（つぎつぎと乗ベキを行なっていって，群のすべての元を与える元）としよう． $G^g = E$（g は群の位数）であるから，演算子 $\hat{G}$ を基底関数 ψ に働かせると，それはただ $\sqrt[g]{1}$ が掛けられればよい．すなわち

$$\hat{G}\psi = e^{2\pi ik/g}\psi,\quad k = 1, 2, \cdots, g$$

であることは明らかである[1]．

群 C_{2h}（およびそれと同型の群 C_{2v} および D_2）はアーベル群であり，したがってその既約表現もまた1次元で，指標は ±1 しかとりえない（そのわけは，どの元の自乗も E だからである）．

つぎに群 C_{3v} を考えよう．群 C_3 とくらべると，ここでは鉛直面の鏡映 σ_v（すべて同一類に属する）がつけ加えられる．対称軸の回りの回転に対して不変な関数（群 C_3 の表現 A の基底関数）は鏡映 σ_v に対して対称かあるいは反対称かである． ところが回転 C_3 に際し ε および ε^2 が掛けられる関数（複素共役表現 E の基底関数）は鏡映に対して互いに移り合う[2]．これらの考察から群 C_{3v}（およびこれと同型の D_3）は二つの1次元既約表現および一つの2次元既約表現をもち，表にのっている指標が導かれる．これでわれわれが実際にすべての既約表現を見いだしたことは， 和 $1^2+1^2+2^2=6$ であり， これが群の位数に等しいことから確かめられる．

同様の考察によって， 同じ型の別の群（C_{4v}, C_{6v}）の表現の指標が見いだされる．

群 T は，四つの傾いた3回対称軸の回りの回転を加えることにより，群 $D_2 \equiv V$ から求められる．群 V の変換に対して不変な関数（表現 A の基底）は回転 C_3 により，ε あるいは ε^2 が掛けられる． ところが群 V の三つの1次元表

---

1) 点群 C_n に対し関数 ψ として，たとえば，関数 $\psi = e^{ik\varphi}$, $k = 1, 2, \cdots, n$ を選ぶことができる．ここで φ は軸のまわりの回転角で，ある定められた方向を基準として測られる．

2) これらの関数を，たとえば $\psi_1 = e^{i\varphi}$, $\psi_2 = e^{-i\varphi}$ の形にとることができる． 鉛直対称面での鏡映で φ の符号は変わる．

現 B_1, B_2, B_3 の基底関数は，3回対称軸のまわりの回転によって互いに移りあう（これはたとえば，これらの関数として座標 x, y, z 自身をとればわかる）．このようにして，三つの1次元既約表現および一つの3次元既約表現を得る $(1^2+1^2+1^2+3^2=12)$．

最後に，同型な群 $\boldsymbol{O}$ および $\boldsymbol{T}_d$ を考察しよう．群 $\boldsymbol{T}_d$ はそれぞれ二つの3回対称軸を含むような平面に対する鏡映 σ_d をつけ加えることによって，群 $\boldsymbol{T}$ から得られる．群 $\boldsymbol{T}$ の恒等表現 A の基底関数は，これらの（同一類に属する）鏡映に対して対称かあるいは反対称かである．これらは群 $\boldsymbol{T}_d$ の二つの1次元表現を与える．3回軸のまわりの回転によって，ε あるいは ε^2 が掛けられる関数（群 $\boldsymbol{T}$ の複素共役表現 E の基底）は，これらの軸を含む平面での鏡映によって互いに移りあい，一つの2次元表現が得られる．最後に群 $\boldsymbol{T}$ の表現 F の三つの基底関数のうち，一つはこの鏡映に対して自分自身に変換され（このとき符号は変わったり，変わらなかったりする）．また他の二つは互いに移りあう．こうして二つの1次元表現，一つの2次元表現および二つの3次元表現が得られる[1]．

われわれに興味のある残りの点群については，これらの群がすでに考察された群と，群 $\boldsymbol{C}_i$（あるいは $\boldsymbol{C}_s$）との直積であること，すなわち

$$\boldsymbol{C}_{3h}=\boldsymbol{C}_3\times\boldsymbol{C}_s \qquad \boldsymbol{D}_{2h}=\boldsymbol{D}_2\times\boldsymbol{C}_i \qquad \boldsymbol{D}_{3d}=\boldsymbol{D}_3\times\boldsymbol{C}_i \qquad \boldsymbol{O}_h=\boldsymbol{O}\times\boldsymbol{C}_i$$
$$\boldsymbol{C}_{4h}=\boldsymbol{C}_4\times\boldsymbol{C}_i \qquad \boldsymbol{D}_{4h}=\boldsymbol{D}_4\times\boldsymbol{C}_i \qquad \boldsymbol{D}_{6h}=\boldsymbol{D}_6\times\boldsymbol{C}_i$$
$$\boldsymbol{C}_{6h}=\boldsymbol{C}_6\times\boldsymbol{C}_i \qquad \boldsymbol{S}_6=\boldsymbol{C}_3\times\boldsymbol{C}_i \qquad \boldsymbol{T}_h=\boldsymbol{T}\times\boldsymbol{C}_i$$

であることに注目すれば，これらの表現はすべて，上記のものからただちに求められる．

これらの直積は，どれももとの群の2倍の既約表現をもち，その半分は反転に対して対称（添字 g であらわされる），他の半分は反対称（添字 u）である．これらの表現の指標は，もとの群の表現の指標に ±1 を掛けて得られる（(94.24) の規則による）．こうして，たとえば群 $\boldsymbol{D}_{3d}$ に対しては，次のような表現が得られる：

1）さらに大きい次元（4あるいは5の）の既約表現は正20面体群にあることを思い起こそう．

D_{3d}	E	$2C_3$	$3U_2$	I	$2S_6$	$3\sigma_d$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1
A_{2g}	1	1	−1	1	1	−1
E_g	2	−1	0	2	−1	0
A_{1u}	1	1	1	−1	−1	−1
A_{2u}	1	1	−1	−1	−1	1
E_u	2	−1	0	−2	1	0

§ 96. 既約表現と項の分類

群論の量子力学への応用は，（原子，分子などの）物理系に対するシュレーディンガー方程式が，これらの系の対称変換に対して不変であることを基礎にしている[1]．このことからただちに，あるエネルギー値（固有値）に対してシュレーディンガー方程式を満足する関数に群の元を掛けることにより，同じエネルギー値をもつ解が得られなければならないことが導かれる．いいかえれば，対称変換に際して，同一のエネルギー準位に属する系の状態の波動関数は互いに変換されあう．すなわち群のある表現をつくる．この表現が既約であることが重要である．実際に，対称変換の際に必ず互いに変換されあう関数は，いつも同一のエネルギー準位に属さなければならない；これに対して，互いに変換されあわない関数のいくつかの組（可約表現の基底がこれらに分解される）に対するエネルギー固有値が一致することは，ひじょうに確率の少ない偶然であるはずである[2]．

このようにして，系エネルギー準位のいずれにも，その対称性の群のある既約表現が対応する．この表現の次元は，その準位の縮退度，すなわち与えられたエネルギーをもつ異なる状態の数を決定する．既約表現を与えることにより，与えられた状態のすべての対称の性質，すなわち種々の対称変換に関するその振舞いが決定される．

1より大きい次元をもつ既約表現は，非可換の元を含むような群だけに存在

1）群論の方法はウィグナーがはじめて量子力学に持ち込んだ（E. P. Wigner, 1926）．

2）もしもこれに対して特異な原因によるものでなければである．この関連で《偶然の》縮退を思い起こそう．それは，系のハミルトニアンが，純幾何学的対称性以上の高次の対称性を持つ結果から生じるものである．これについてはこの章で触れる（§ 36 末尾参照）．

する（アーベル群は1次元既約表現だけしかもたない）．これに関連して縮退と，互いに非可換な（しかしハミルトニアンとは可換な）演算子の存在との関係は，群論とは関係のない考察（§10）ですでに明らかになっていることを，ここで思い起こせばよい．

これらのすべての主張には重要な注釈をつける必要がある．すでに示されたように（§18），時間反転に対する対称性（これは磁場がないと起こる）は量子力学において，複素共役波動関数が同一のエネルギー固有値に属する結果をもたらす．これから，もしもある関数系とそれに複素共役な関数系とが群の異なる同値でない既約表現をつくり出せば，群のこれら二つの複素共役表現はいっしょにして，次元を倍にした一つの《物理的既約》表現とみなす必要がある（以下いたるところでこうであると約束する）．前節にこのような表現の例があった．たとえば，群 $\boldsymbol{C}_3$ は1次元表現だけをもっている；しかしながら，これらの中の二つは複素共役であり，物理的には2重に縮退したエネルギー準位に対応する（磁場があると，時間符号の反転に対する対称性は存在しなくなり，したがって複素共役表現は異なるエネルギー準位に対応する[1]）．

物理系がある摂動の作用を受ける（すなわち，系が外場中に置かれる）と仮定しよう．摂動がどの程度縮退準位の分裂をもたらすか，という問題が生ずる．外場はそれ自身で固有なある対称性をもっている[2]．もしもこの対称性が非摂動系の対称性と同じか，それより高ければ[3]，摂動ハミルトニアン $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}$ の対称性は非摂動演算子の対称性と一致する．この場合は縮退準位の分裂は起こらないことは明らかである．ところが，もしも摂動の対称性が非摂動系の対称性よりも低ければ，ハミルトニアン $\hat{H}$ の対称性は摂動 $\hat{V}$ の対称性と一致する．演算子 $\hat{H}_0$ の対称性の群の既約表現をつくる波動関数はまた，摂動演算子 $\hat{H}$ の対称性の群の表現をつくる．しかし，この表現は可約であることを示すことができる．これは縮退準位の分裂を意味する．例をあげて，群論とい

1) 厳密に言えば，指標が実数であること（すなわち，複素共役表現が同値であること）は，群の表現の実の基底関数を選ぶ可能性を保証する十分条件ではない．

2) たとえば，周囲の原子と弱い相互作用をする結晶格子のイオンの d および f 殻のエネルギー準位の話でもよい．摂動（外場）は，この場合，残りの原子の側からイオンに働く場である．

3) もしも対称性の群 $\boldsymbol{H}$ が群 $\boldsymbol{G}$ の部分群であれば，$\boldsymbol{H}$ はより低い対称性に，$\boldsymbol{G}$ はより高い対称性に対応するという．一つが $\boldsymbol{G}$ の対称性をもち，他が $\boldsymbol{H}$ の対称性をもつ二つの式の和の対称性は，より低い $\boldsymbol{H}$ の対称性と一致する．

う数学的方法がどのようにして若干の準位の分裂の具体的問題を解くかを示そう.

非摂動系が対称性 $\boldsymbol{T_d}$ をもつとして，この群の既約表現 $\boldsymbol{F_2}$ に対応する 3 重縮退を考察しよう；この表現の指標は

E	$8C_3$	$3C_2$	$6\sigma_d$	$6S_4$
3	0	−1	1	−1

である．系が対称性 $\boldsymbol{C_{3v}}$（群 $\boldsymbol{T_d}$ の 3 回転の一つと一致する 3 回軸をもつ）をもつ摂動の作用を受けると仮定しよう．縮退準位の 3 つの波動関数は（群 $\boldsymbol{T_d}$ の部分群である）群 $\boldsymbol{C_{3v}}$ の表現をつくる．このときこの表現の指標は単に，群 $\boldsymbol{T_d}$ のもとの表現中の同じ元の指標．すなわち

E	$2C_3$	$3\sigma_v$
3	0	1

に等しい．しかしながら，この表現は可約である．群 $\boldsymbol{C_{3v}}$ の既約表現の指標を知ると，（一般則（94.14）に従って）その既約部分への分解を行なうのは容易である．このようにして，この表現は群 $\boldsymbol{C_{3v}}$ の表現 A_1 と E に分解される．したがって 3 重縮退準位 $\boldsymbol{F_2}$ は，一つの非縮退準位 A_1 と一つの 2 重縮退準位 $\boldsymbol{E}$ とに分裂する．もしも同じ系が対称性 $\boldsymbol{C_{2v}}$（これもまた群 $\boldsymbol{T_d}$ の部分群である）をもつ摂動の作用を受ければ，同じ準位 $\boldsymbol{F_2}$ の波動関数は，指標

E	C_2	σ_v	σ_v'
3	−1	1	1

をもつ表現を与える．これを既約部分に分けると，これが表現 A_1, B_1, B_2 を含むことがわかる．このように，この場合には準位の三つの非縮退準位への完全分裂が行なわれる.

§ 97. 行列要素に対する選択規則

群論は任意の物理系の項の分類を可能にするだけでなく，系を特徴づける種種の量の行列要素に対する，選択規則を見いだす簡単な方法をもまた与えている.

この方法は次のような一般的定理を基礎にしている．$\psi_i^{(\alpha)}$ を対称性の群の

（恒等表現でない）既約表現の基底関数の一つとしよう．このときこれの全空間での積分[1]は恒等的にゼロになる：

$$\int \psi_i^{(\alpha)} dq = 0. \tag{97.1}$$

証明はつぎのような明瞭な事情に基づいている．すなわち，全空間にわたる積分は，任意の対称変換を含めて，座標系の任意の変換に対して不変なことである．したがって，

$$\int \psi_i^{(\alpha)} dq = \int \hat{G} \psi_i^{(\alpha)} dq = \int \sum_k G_{ki}^{(\alpha)} \psi_k^{(\alpha)} dq$$

である．この等式を群のすべての元について加える．左の積分は単に群の位数 g が掛けられる．そしてわれわれは

$$g \int \psi_i^{(\alpha)} dq = \sum_k \int \psi_k^{(\alpha)} \sum_G G_{ki}^{(\alpha)} dq$$

を得る．しかしながら，すべての非恒等既約表現に対しては恒等的に $\sum_G G_{ki}^{(\alpha)} = 0$ となる（これは直交関係（94.7）の特別な場合で，そこで既約表現の一つは恒等表現になっている）．これにより定理は証明された．

もしも ψ が群のある可約表現に属するものであれば，この表現がその中に恒等表現を含むような場合にだけ積分 $\int \psi dq$ は 0 と異なるはずである．この定理は前の定理の直接の結果である．

$\hat{f}$ をあるスカラー物理量の演算子としよう．定義に従って，それはあらゆる対称変換に関して不変である．その行列要素は積分

$$\langle \beta k | f | \alpha i \rangle = \int \psi_k^{(\beta)} \hat{f} \psi_i^{(\alpha)} dq \tag{97.2}$$

であり，添字 α, β はこの系の異なるエネルギー準位を区別し，添字 i, k は同一の縮退準位に属する波動関数を番号づける[2]．与えられた系の対称性の群の関数 $\psi_i^{(\alpha)}$ および $\psi_k^{(\beta)}$ によってつくられる既約表現を $D^{(\alpha)}$ および $D^{(\beta)}$ の記号であらわすことにしよう．量 f の対称性に対応する同じ群の表現を記号 D_f であらわそう．これは f のテンソルの性質に依存する．したがって，もしも f が真正スカラーならば，その演算子 $\hat{f}$ はすべての対称変換に対して不変であり，し

---

1) 与えられた物理系の位相空間を意味する．

2) 《物理的既約》表現に移った後は，基底関数は実に選ぶことができるので，（97.2）では波動関数とその複素共役との区別はない．

たがって D_f は恒等表現になる．もしも群が対称軸だけを含んでいるならば，同じことが擬スカラー量にも成り立つ．もしも群が鏡映もまた含んでいるならば，D_f は1次元だが恒等表現ではない，もしも f がベクトル量ならば，D_f は3個の互いに変換しあうベクトル成分によって作られる表現になる．この表現は，一般に極性ベクトルと軸性ベクトルに対して異なっている．

積 $\psi_k^{(\beta)}\hat{f}\psi_i^{(\alpha)}$ は群の直積 $D^{(\beta)}\times D_f\times D^{(\alpha)}$ で表わされる表現を作る．この表現がその中に恒等表現を含むならば，あるいは，直積 $D^{(\beta)}\times D^{(\alpha)}$ がその中に D_f を含むならば，行列要素はゼロと異なる．実際には直積 $D^{(\alpha)}\times D_f$ を既約部分に分解すると便利である．そうすることによりわれわれはただちに，（$D^{(\alpha)}$ 型の状態からの）遷移に対する行列要素がゼロと異なるすべての $D^{(\beta)}$ 型の状態を知ることになる．

最も簡単なスカラー量の場合には，D_f は恒等表現になる．これからただちに，同じ型の状態間の遷移のみがゼロと異なることがわかる（実際に，二つの異なった既約表現の直積 $D^{(\alpha)}\times D^{(\beta)}$ は恒等表現を含まない．しかしながら恒等表現はある既約表現の自分自身との直積にいつも含まれる）．これが理論の最も一般的な定式化であり，特殊な場合にはすでに一度ならず遭遇している．

エネルギーについて対角的な行列要素，すなわち同一の項に属する状態間の遷移に対する行列要素は（同じ型の二つの相異なる項に属する状態間の遷移と違って）特別な考察を必要とする．この場合にわれわれには（相異なる二つのではなく）唯一つだけの関数系 $\psi_1^{(\alpha)}, \psi_2^{(\alpha)}, \cdots$ があることになる．選択則は，ここでは時間反転の際の量 f の振舞に依存して異なった形になる．

波動関数 $\psi=\sum_i c_i\psi_i^{(\alpha)}$ によって記述される状態を考察しよう．この状態での量 f の平均値は和

$$\bar{f}=\sum_{i,k} c_k^* c_i\langle\alpha k|f|\alpha i\rangle$$

で与えられる．複素共役の波動関数 $\psi^*=\sum c_i^*\psi_i^{(\alpha)}$ を持つ状態では

$$\bar{f}=\sum_{i,k} c_k c_i^*\langle\alpha k|f|\alpha i\rangle=\sum_{i,k} c_i c_k^*\langle\alpha i|f|\alpha k\rangle$$

である．もしも量 f が時間反転に対して不変であれば，二つの状態は同一のエネルギー準位に属するだけでなく，同じ値の $\bar{f}$ を持つはずである．係数 c_i の任意性から，これは

$$\langle\alpha k|f|\alpha i\rangle=\langle\alpha i|f|\alpha k\rangle$$

を意味する．したがって選択則を見出すためには，直積 $D^{(\alpha)}\times D^{(\alpha)}$ 全体でなく，その対称部分 $[D^{(\alpha)2}]$ だけを考えればよい．もしも $[D^{(\alpha)2}]$ がその中に D_f を含めば[1]，ゼロと異なる行列要素が存在する．

もしも量 f が時間反転に対して符号を変えるならば，$\psi\to\psi^*$ の置き換えは $\bar{f}$ の符号の変化を伴う．これから同じ方法で

$$\langle\alpha k|f|\alpha i\rangle=-\langle\alpha i|f|\alpha k\rangle$$

を得る．この場合は，したがって，選択則は直積の反対称部分 $\{D^{(\alpha)2}\}$ の分解により決定される．

問　　題

1. 対称性 $\boldsymbol{O}$ が存在するとき，電気2重極モーメント $\boldsymbol{d}$ と磁気2重極モーメント $\boldsymbol{\mu}$ の行列要素に対する選択規則を見いだせ．

解　群 $\boldsymbol{O}$ は鏡映を含まない．したがって極性 ($\boldsymbol{d}$) および軸性 ($\boldsymbol{\mu}$) ベクトルは同じ既約表現 F_1 に従って変換される．F_1 と群 O の他の表現との直積の分解は

$$\begin{gathered}F_1\times A_1=F_1,\qquad F_1\times A_2=F_2,\qquad F_1\times E=F_1+F_2\\ F_1\times F_1=A_1+E+F_1+F_2,\qquad F_1\times F_2=A_2+E+F_1+F_2\end{gathered}\tag{1}$$

したがって，次の遷移に対して非対角行列要素はゼロと異なる：

$$F_1\longleftrightarrow A_1,\ E,\ F_1,\ F_2;\quad F_2\longleftrightarrow A_2,\ E,\ F_1,\ F_2.$$

群 $\boldsymbol{O}$ の既約表現の対称および反対称積は

$$\begin{gathered}[A_1^2]=[A_2^2]=A_1,\quad [E^2]=A_1+E,\quad [F_1^2]=[F_2^2]=A_1+E+F_2,\\ \{E^2\}=A_2,\quad \{F_1^2\}=\{F_2^2\}=F_1.\end{gathered}\tag{2}$$

対称積は F_1 を含まない．したがって，（時間反転に対して不変の）ベクトル $\boldsymbol{d}$ の（エネルギーに関して）対角行列要素は存在しない．これに反し（時間反転に対して符号を変える）磁気モーメントは状態 F_1 と F_2 に対する対角行列要素を持っている．

2. 対称性 $\boldsymbol{D}_{3d}$ が存在するとき前問と同じことを行なえ．

解　群 $\boldsymbol{D}_{3d}$ でのベクトル $\boldsymbol{d}$ と $\boldsymbol{\mu}$ の変換則は違っている．すなわち

$$\begin{gathered}d_x,\ d_y\sim E_u,\qquad d_z\sim A_{2u},\\ \mu_x,\ \mu_y\sim E_g,\qquad \mu_z\sim A_{2g}\end{gathered}$$

である（ここおよび以下の問題で記号 ～ は《表現に従って変換される》という意味）．

$$\begin{gathered}E_u\times A_{1g}=E_u\times A_{2g}=E_u,\quad E_u\times A_{1u}=E_u\times A_{2u}=E_g\\ E_u\times E_u=A_{1g}+A_{2g}+E_g,\quad E_u\times E_g=A_{1u}+A_{2u}+E_u\end{gathered}\tag{3}$$

---

1) 積 $[D^{(\alpha)2}]$ はいつも恒等表現を含んでいる．したがって，スカラー量に対して対角要素は（同じ型の状態間では非対角要素も同様）ゼロと異なる．

となり，したがって遷移 $E_u \longleftrightarrow A_{1g},\ A_{2g},\ E_g$；$E_g \longleftrightarrow A_{1u},\ A_{2u},\ E_u$ に対して d_x, d_y の非対角行列要素がゼロと異なる．同様にして，A_z の行列要素に対する選択規則が見いだされる．すなわち

d_z に対し　$A_{1g} \longleftrightarrow A_{2u}$；　$A_{2g} \longleftrightarrow A_{1u}$；　$E_g \longleftrightarrow E_u$；

μ_x, μ_y に対し　$E_g \longleftrightarrow A_{1g},\ A_{2g},\ E_g$；　$E_u \longleftrightarrow A_{1u},\ A_{2u},\ E_u$；

μ_z に対し　$A_{1g} \longleftrightarrow A_{2g}$；　$A_{1u} \longleftrightarrow A_{2u}$；　$E_g \longleftrightarrow E_g$；　$E_u \longleftrightarrow E_u$

である．

群 $\boldsymbol{D}_{3d}$ の既約表現の対称および反対称積は

$$[A_{1g}^2] = [A_{1u}^2] = [A_{2g}^2] = [A_{2u}^2] = A_{1g}, \quad [E_g^2] = [E_u^2] = E_g + A_{1g},$$
$$\{E_g^2\} = \{E_u^2\} = A_{2g} \tag{4}$$

に等しい．これから，$\boldsymbol{d}$ のすべての成分の（エネルギーについて）対角な行列要素は存在しない．ベクトル $\boldsymbol{\mu}$ に対しては μ_z の対角行列要素が，E_g と E_u の型の縮退した準位の状態間の遷移に対して存在する．

3.　対称性 $\boldsymbol{O}$ があるとき電気的 4 重極モーメントのテンソル Q_{ik} の行列要素に対する選択則を求めよ．

解　テンソル（和 Q_{ii} がゼロに等しい対称テンソル）の成分 Q_{ik} は群 $\boldsymbol{O}$ に対して次の法則で変換される：

$$Q_{xy},\ Q_{xz},\ Q_{yz} \sim F_2,$$
$$Q_{xx} + \varepsilon Q_{yy} + \varepsilon^2 Q_{zz}, \quad Q_{xx} + \varepsilon^2 Q_{yy} + \varepsilon Q_{zz} \sim E \quad (\varepsilon = e^{2\pi i/3}).$$

F_2 と E の群のすべての表現との直積を分解して，非対角行列要素に対する選択則を得る．すなわち

$Q_{xy},\ Q_{xz},\ Q_{yz}$ に対し　$F_1 \longleftrightarrow A_2,\ E,\ F_1,\ F_2$；　$F_2 \longleftrightarrow A_1,\ E,\ F_1,\ F_2$；

$Q_{xx},\ Q_{yy},\ Q_{zz}$ に対し　$E \longleftrightarrow A_1,\ A_2,\ E$；　$F_1 \longleftrightarrow F_1,\ F_2$；　$F_2 \longleftrightarrow F_2$

である．

対角行列要素は（(2) からわかるように）次の状態に存在する：

$Q_{xy},\ Q_{xz},\ Q_{yz}$ に対し　$F_1,\ F_2,$

$Q_{xx},\ Q_{yy},\ Q_{zz}$ に対し　$E,\ F_1,\ F_2$

4.　同じことを対称性 $\boldsymbol{D}_{3d}$ のときに行なえ．

解　成分 Q_{ik} の群 $\boldsymbol{D}_{3d}$ に対する変換則は

$$Q_{zz} \sim A_{1g};\quad Q_{xx} - Q_{yy},\ Q_{xy} \sim E_g;\quad Q_{xz},\quad Q_{yz} \sim E_g$$

である．Q_{zz} はスカラーのように振舞う．E_g と群のすべての表現との直積を分解して，残りの成分 Q_{ik} の非対角行列要素に対する選択則が得られる．すなわち

$$E_g \longleftrightarrow A_{1g},\ A_{2g},\ E_g;\quad E_u \longleftrightarrow A_{1u},\ A_{2u},\ E_u.$$

対角要素は（(4) からわかるように）状態 E_g および E_u に対してのみゼロと異なる．

§98. 連 続 群

§93で列挙された有限点群のほかに，無限個の元をもつ**連続点群**といわれるものが存在する．これは**軸対称**および**球対称**の群である．

群 $\boldsymbol{C}_\infty$ は軸対称の群のなかで最も簡単である．これは対称軸のまわりの任意の角度 φ の回転 $C(\varphi)$ を含んでいる（これを**2次元回転群**と呼ぶ）．この群を，群 $\boldsymbol{C}_n$ の $n\to\infty$ の極限の場合と見なすことができる．同様に，群 $\boldsymbol{C}_{nh}, \boldsymbol{C}_{nv}, \boldsymbol{D}_n, \boldsymbol{D}_{nh}$ の極限の場合として，連続群 $\boldsymbol{C}_{\infty h}, \boldsymbol{C}_{\infty v}, \boldsymbol{D}_\infty, \boldsymbol{D}_{\infty h}$ を得る．

分子は一直線上に配列された原子からなる場合にのみ軸対称であり得る．もしもこのとき，それがその中心に対して対称でなければ，その点群は群 $\boldsymbol{C}_{\infty v}$ で，軸の回りの回転の他に軸を通る任意の平面での鏡映 σ_v も含んでいる．ところがもしも分子がその中心に対して対称ならば，その点群は群 $\boldsymbol{D}_{\infty h}=\boldsymbol{C}_{\infty v}\times\boldsymbol{C}_i$ となる．群 $\boldsymbol{C}_\infty, \boldsymbol{C}_{\infty h}, \boldsymbol{D}_\infty$ に関しては，これらは一般には分子の対称性の群としては存在し得ない．

完全球対称の群は，中心を通る任意の軸のまわりの任意の角度の回転と，同じ点を通る任意の平面での鏡映とを含んでいる；この群（これをわれわれは $\boldsymbol{K}_h$ であらわそう）は個々の原子の対称性の群である．それは全空間回転の群 $\boldsymbol{K}$（これを**3次元回転群**，あるいは単に**回転群**と呼ぶ）を部分群として含んでいる． 群 $\boldsymbol{K}_h$ は対称中心をつけ加えることにより群 $\boldsymbol{K}$ から求められる（$\boldsymbol{K}_h=\boldsymbol{K}\times\boldsymbol{C}_i$）．

連続群の元は，連続的な一連の値をとる1個，あるいは若干個のパラメーターによって識別することができる．したがって回転群では，たとえば座標系の回転をきめる三つのオイラー角がこのようなパラメーターである．

§92で記されている有限群の一般的性質，およびそれに関係ある諸概念（たとえば，部分群，共役元，類その他）はただちに連続群に一般化される．もちろん，群の位数と直接結びついた命題（たとえば部分群の位数が群の位数の約数であるという命題）は意味を失う．

群 $\boldsymbol{C}_{\infty v}$ ではすべての対称面は同値である．したがって，すべての鏡映 σ_v は，連続な一連の元をもつ一つの類を形成する；対称軸は二面的であり，したがっておのおのが二つの元 $C(\pm\varphi)$ を含むような，連続な一連の類を得ることになる．$\boldsymbol{D}_{\infty h}=\boldsymbol{C}_{\infty v}\times\boldsymbol{C}_i$ なので，群 $\boldsymbol{D}_{\infty h}$ の類は群 $\boldsymbol{C}_{\infty v}$ の類から直接に得られる．

回転群 $\boldsymbol{K}$ においてはすべての軸が同値で二面的である；したがって，この群の類は，任意の軸のまわりの，定められた絶対値 $|\varphi|$ の角度の回転である．群 $\boldsymbol{K}_h$ の類は群 $\boldsymbol{K}$ の類から直接に求められる．

表現の概念は――可約も既約も――また連続群の場合にそのまま一般化される．どの既約表現も連続的な一連の行列を含んでいるが，互いに変換しあう基底関数の数（表現の次元）は有限である．これらの関数は，いつも表現がユニタリーであるように選ぶことができる．連続群の相異なる既約表現の数は無限である．しかしそれらは離散的な列を作っている．すなわち，一連の数字で番号づけをすることができる．これらの表現の行列要素と指標に対して，有限群に対する類似の関係を一般化した規格直交性が成り立つ．(94.9) の代りに今は

$$\int G_{ik}^{(\alpha)} G_{lm}^{(\beta)*} d\tau_G = \frac{1}{f_\alpha} \delta_{\alpha\beta} \delta_{il} \delta_{km} \int d\tau_G, \tag{98.1}$$

また (94.10) の代りに

$$\int \chi^{(\alpha)}(G) \chi^{(\beta)}(G)^* d\tau_G = \delta_{\alpha\beta} \int d\tau_G \tag{98.2}$$

が成り立つ．これらの公式中の積分はいわゆる群についての不変積分である．すなわち，積分要素 $d\tau_G$ は群のパラメーターとその微分を使ってあらわされる．ただこのときに，その要素に群のすべての変換を作用させると，またふたたび積分要素が得られるようにしてある[1]．したがって，回転群では $d\tau_G = \sin\beta d\alpha d\beta d\gamma$ のように選ぶことができる．ここで α, β および γ は座標系の回転を決定するオイラー角である（§58）．またこのとき $\int d\tau_G = 8\pi^2$ である．

全角運動量の固有値と固有関数を決定したときに，すでに，（そのときには群論の言葉は使わないで）3次元回転群の既約表現を実際には見出していた．角運動量成分の演算子は（定数因子を除いて）無限小回転の演算子であり[2]，角運動量の固有値は空間回転に対する波動関数の振舞いを特徴づけている．角運動量の値 j は角運動量の投影値 m を異にする，$(2j+1)$ 個の異なる固有関数 ψ_{jm} に対応し，一つの $(2j+1)$ 重縮退のエネルギー準位に対応する．座標系の

1）連続群の既約表現についての上述の主張は積分 (98.1)，(98.2) が収束する条件の下でのみ成立する．とくに《群の体積》$\int d\tau_G$ は有限でなければならない．連続点群に対してこの条件は満足されている（例えば相対論で遭遇するいわゆるローレンツ群に対しては満足されない）．

2）数学的な用語では，これらの演算子は回転群の生成子と呼ばれる．

回転によってこれらの関数は互いに変換され，このようにして回転群の既約表現をつくる．したがって，群論の観点からは量子数 j は回転群の既約表現を番号づける．ここで各 j には一つの $(2j+1)$-次元の表現が対応する．量子数 j は整数および半整数の値をとる．したがって，表現の次元 $2j+1$ はすべての整数値 $1, 2, 3, \cdots$ をとる．

これらの表現の基底関数は，実質的にはすでに§56，§57で研究してある．与えられた j をもつ表現の基底は $2j$ 階の対称スピノールの $(2j+1)$ 個の独立成分である（これは $2j+1$ 個の関数 ψ_{jm} の集合と同等である）．

半整数の j の値に対応する回転群の既約表現は，重要な性質をもっている．それはこういうことである．すなわち，角度 2π の回転によって，その基底関数（奇数階のスピノール成分）は符号を変える．しかし 2π の回転は群の単位元と一致するので，半整数の j をもつ表現は，いわゆる**2価**であるという結果に到達する：群の各元（ある軸のまわりの角度 φ の回転，$0 \leqq \varphi \leqq 2\pi$）はこのような表現では逆符号の指標をもつ二つの行列に対応する[1]．

孤立した原子は，すでに注意したように，対称性 $\boldsymbol{K}_h = \boldsymbol{K} \times \boldsymbol{C}_i$ をもつ．したがって，群論の観点からは，原子の各項は回転群 $\boldsymbol{K}$ のある既約表現（これは原子の全角運動量 J の値を決定する），および群 $\boldsymbol{C}_i$ の既約表現（これは状態の偶奇性を決定する）に対応する[2]．

外部電場の中に原子を置くと，原子のエネルギー準位は分裂する．このとき生ずる異なる準位の数と，対応する状態の対称性は§96に記された方法で決定される．このためには外場の対称性の群の $(2J+1)$-次元の可約表現（これは関数 ψ_{JM} によってつくられる）を，この群の既約表現に分解する必要がある．これに関連して，関数 ψ_{JM} によってつくられる表現の指標を知る必要がある．

---

1) 群の《2価表現》は言葉の真の意味での表現ではないことをいう必要がある．なぜかというと，1価関数でない基底があらわれるからである．§99をも参照せよ．

2) このほか，原子のハミルトニアンは電子の置換に対して不変である．非相対論的近似では，座標およびスピン波動関数は分離され，座標関数から生ずる置換群の表現を問題にすることができる．置換群の既約表現を与えることにより，原子の全スピン S が決定される（§63）．ところが相対論的相互作用を考慮すると，波動関数の座標およびスピン部分への分離は不可能である．粒子の座標とスピンの同時置換に対する対称性は項の特性に何ももたらさない．なぜかというと，パウリ原理は全電子について反対称な全波動関数だけを許すからである．このことは，相対論的相互作用を考慮すると，厳密にいえば，スピンは保存されない（全角運動量 J だけが保存される）ことに対応する．

一つの類の元の既約表現の指標は同じなので，一つの軸—— z 軸のまわりの回転を考察すればよい．ある軸のまわりの角度 φ の回転を行なうと，波動関数 ψ_{JM} には，すでに知っているように，$e^{iM\varphi}$ が掛けられる．ここで M は角運動量の与えられた軸への投影である．したがって，関数 ψ_{JM} の変換行列は対角的で，その指標は

$$\chi^{(J)}(\varphi)=\sum_{m=-J}^{J}e^{iM\varphi}=\frac{e^{i(J+1)\varphi}-e^{-iJ\varphi}}{e^{i\varphi}-1},$$

あるいは[1)]

$$\chi^{(J)}(\varphi)=\frac{\sin(J+1/2)\varphi}{\sin(\varphi/2)} \qquad (98.3)$$

である．

ところが反転 I に対して，M の異なるすべての関数 ψ_{JM} は同一に振舞う．すなわち，原子の状態が偶か奇かに従って，$+1$ あるいは -1 が掛けられる．したがって，指標は

$$\chi^{(J)}(I)=\pm(2J+1) \qquad (98.4)$$

である．最後に，平面での鏡映 σ および角度 φ の回転鏡映の指標は，これらの対称変換を

$$\sigma=IC_2, \qquad S(\varphi)=IC(\pi+\varphi)$$

の形にあらわすことによって計算される．

軸対称の群 $C_{\infty v}$ の既約表現についてもう少し詳論しよう．対称性 $C_{\infty v}$ をもつ2原子分子（すなわち両方の原子が異なるとき）の電子項の分類を明らかにしたとき，この問題は実質的にはすでに解かれている．（$\Omega=0$ をもつ項の）0^+ および 0^- 項には，二つの1次元表現が対応する：すなわち恒等表現 A_1 および表現 A_2 であり，後者の基底関数はすべての回転に対して不変だが，平面での鏡映 σ_v に対しては符号を変える．$\Omega=1, 2, \cdots$ をもつ2重縮退の項には2次元表現が対応し，これらを $E_1, E_2, \cdots$ とあらわす．これらの基底関数は，軸のまわりの角度 φ の回転を行なうと $e^{\pm i\Omega\varphi}$ が掛けられ，平面での鏡映 σ_v に対しては互いに変換される．これらの表現の指標は

1）誤解を避けるために，この公式は群の元の，オイラー角によるパラメーター化とは別のパラメーター化であること，すなわち回転軸の方向とその軸のまわりの回転角 φ とによるものであることを断っておこう．このようなパラメーター化のときは，たとえば(98.2)の中の積分は $2(1-\cos\varphi)d\varphi do$ によって行なわれる．ここで do は回転軸の方向に対する立体角要素である．

$\boldsymbol{C_{\infty v}}$	E	$2C(\varphi)$	$\infty\sigma_v$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E_k	2	$2\cos k\varphi$	0

(98.5)

群 $\boldsymbol{D_{\infty h}}=\boldsymbol{C_{\infty v}}\times\boldsymbol{C_i}$ の既約表現は，群 $\boldsymbol{C_{\infty v}}$ の表現から直接に求められる（そして同じ原子核をもつ2原子分子の項の分類に対応する）．

もしも Ω に対して半整数をとれば，関数 $e^{\pm i\Omega\varphi}$ は群 $\boldsymbol{C_{\infty v}}$ の2価既約表現をつくり，これは半整数スピンをもつ分子項に対応する[1]．

§ 99. 有限点群の2価表現

半整数のスピン（したがって半整数の全角運動量）をもつ系の状態は，この系の対称性の点群の2価表現に対応する．これはスピノールの一般的性質で，したがって連続点群に対しても，有限点群に対しても成立する．これに関連して有限点群の**2価**既約表現を求める問題が生ずる．

すでに指摘したように，2価表現は本来真の群表現ではない．とくに，§94で述べた関係式が，これには成り立たない．これらの関係式の中で（たとえば，既約表現の次元の自乗の和に対する関係式(94.17)の中で）すべての既約表現について語られているが，その中にはただ真の1価表現だけが含まれると暗暗裏に了解されていた．

2価表現を求めるのには，次のような技巧的な方法を使うと便利である（H. A. Bethe, 1929）．任意の軸のまわりの角度 2π の回転を，単位元ではなく，それ自身を2回使うと E と一致する元として，純形式的に群の新しい元の概念を導入しよう（これを Q であらわそう）．すると $Q^2=E$ である．これに対応して，n 回対称軸のまわりの回転 C_n は $2n$ 回（n 回ではない）自分自身を適用してのみ恒等変換を与えることになる．すなわち：

$$C_n^n=Q,\qquad C_n^{2n}=E. \tag{99.1}$$

1) 3次元回転群と違って，ここでは Ω の分数値を適当に選ぶことにより，1価および2価表現のみでなく，3価およびより多価の表現が得られるはずである．しかしながら3次元の無限小回転の演算子としての角運動量の物理的に可能な固有値は，まさに3次元回転群の表現により定義される．したがって，2次元回転群（または任意の有限の対称性の群）の3価（およびより多価）の表現は，数学的に定義できても，物理的意味はもたない．

反転 I は，すべての回転と可換な元であるので，2回適用すると前と同様に E を与えなければならない．平面での2回の鏡映は E でなく Q になる．すなわち

$$\sigma^2=Q, \qquad \sigma^4=E \tag{99.2}$$

である（これは，鏡映が $\sigma_h=IC_2$ の形に書くことができることから出てくる）．結果としてわれわれは，位数がもとの群の2倍の，ある架空の対称性の点群を構成する元の集合を得る．これらの群のことを**2重点群**ということにしよう．実際の点群の2価表現は，明らかに，対応する2重の群の1価表現，すなわち真の表現になっている．したがって，それを求めるためにはふつうの方法を使うことができる．

2重群の類の数はもとの群の類の数よりも多い（しかし一般には2倍ではない）．元 Q は群の他のすべての元と可換である[1]．したがっていつも自身で類を形成する．もしも対称軸が二面的であれば．2重群でそれは元 C_n^k と $C_n^{2n-k}=QC_n^{n-k}$ が共役であることを意味する．これに関連して2回軸が存在するとき，元の類への分配はこの軸が二面的かどうかにも依存する（ふつうの点群ではこれは重要ではない．なぜかというと C_2 は逆回転 C_2^{-1} と一致するからである）．

したがって，たとえば群 T では2回軸は同値であり，そのおのおのは二面的である．しかし3回軸は同値であるが二面的ではない．したがって，2重群 T' [2]の24の元は七つの類に分配される：E，Q，三つの回転 C_2 と三つの C_2Q からなる類，類 $4C_3, 4C_3^2, 4C_3Q, 4C_3^2Q$ である．

2重点群のすべての既約表現の中には，まず第一に，ふつうの群の1価表現と一致する表現があり（ここでは元 Q も E も単位行列に対応する），2番目にはふつうの群の2価表現がある（ここでは Q は負の単位行列に対応する）；われわれにいま興味があるのは，まさにこれらのうちの後者の表現である．

2重群 C_n' $(n=1, 2, 3, 4, 6)$ および S_4' は，これに対応するふつうの群と同様に巡回群である[3]．これらのすべての既約表現は1次元で，§95で明らかにされたように，何の困難もなしに見いだすことができる．

1）回転と反転についてはこれは明らかである．平面での鏡映に対しては，鏡映は反転と回転の積としてあらわし得ることから出る．

2）2重群をふつうの群の記号にダッシュをつけて区別しよう．

3）これに反し，群 $S_2'\equiv C_i'$，$S_6'\equiv C_{3i}'$ は反転 I を含み，アーベル群であるが，巡回群ではない．

群 D'_n（あるいはこれに同型な C'_{nv}）の既約表現は，対応するふつうの群に対するのと同様な方法で見いだすことができる．この表現は $e^{\pm ik\varphi}$ の形の関数でつくられる．ここで φ は n 回軸のまわりの回転角であり，k に対しては半整数の値がとられる（整数値はふつうの1価表現に対応する）．2回の水平軸の回りの回転は，これらの関数を互いに移しあい，回転 C_n は $e^{\pm 2\pi ik/n}$ をかける．

2重立方体群の表現を見いだすのはいくらか困難である．群 T' の24個の元は七つの類に分配される．したがって合計7個の既約表現があり，その中の四つはふつうの群 T の表現と一致する．残りの三つの表現の次元の自乗の和は12に等しくなければならない．これからこれらすべてが2次元であることがわかる．元 C_2 と C_2Q が一つの類に属するので，$\chi(C_2)=\chi(C_2Q)=-\chi(C_2)$ である．これから三つのすべての表現では $\chi(C_2)=0$ であると結論することができる．さらに，三つの表現の中で少なくとも一つは実でなければならない；何となれば，複素表現は，互いに共役な対になってのみあらわれることができるからである．この表現を考察し，元 C_3 の行列は対角型にすることができると仮定しよう（a_1, a_2 をその対角要素としよう）．$C_3^3=Q$ であるから，$a_1^3=a_2^3=-1$ である．$\chi(C_3)=a_1+a_2$ が実数になるためには，$a_1=e^{\pi i/3}$，$a_2=e^{-\pi i/3}$ ととる必要がある．これから，$\chi(C_3)=1$，$\chi(C_3^2)=a_1^2+a_2^2=-1$ を見いだす．このようにして，求める表現の中の一つが求められる．これと群 T の二つの複素共役な1次元表現との直積をつくると，残りの二つの表現が得られる．

ここでは詳論しないが，同様な考察により群 O' の表現を見いだすことができる．総括の第8表には，列挙された2重群の表現の指標が与えられている（ふつうの群の2価表現に対応する表現だけがあげられている）．これらに同型な2重群はまったく同じ表現をもつ．

残りの点群はすでに考察されたものと同型か，これと群 C_i との直積の結果得られる．したがって，その表現は特別の計算を必要としない．

ふつうの表現に対するのとまったく同じ原因で，二つの複素共役の2価表現は，物理的観点からは2倍の次元をもつ表現とみなされる．ところが1次元の2価表現は，もしもその指標が実数ならば，2倍にしなければならない．それは次のようなことである（§60参照）：半整数のスピンをもつ系では複素共役の波動関数は1次独立である．したがって，（ある関数 ψ によりつくられる）

第8表　点群の2価表現

D_2'	E	Q	$C_2^{(x)}$ $C_2^{(x)}Q$	$C_2^{(y)}$ $C_2^{(y)}Q$	$C_2^{(z)}$ $C_2^{(z)}Q$
E'	2	-2	0	0	0

D_3'	E	Q	C_3 C_3^2Q	C_3^2 C_3Q	$3U_2$	$3U_2Q$
E_1' {	1	-1	-1	1	i	$-i$
	1	-1	-1	1	$-i$	i
E_2'	2	-2	1	-1	0	0

D_6'	E	Q	C_2 C_2Q	C_3 C_3^2Q	C_3^2 C_3Q	C_6 C_6^5Q	C_6^5 C_6Q	$3U_2$ $3U_2Q$	$3U_2'$ $3U_2'Q$
E_1'	2	-2	0	1	-1	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0	0
E_2'	2	-2	0	1	-1	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0	0
E_3'	2	-2	0	-2	2	0	0	0	0

D_4'	E	Q	C_2 C_2Q	C_4 C_4^3Q	C_4^3 C_4Q	$2U_2$ $2U_2Q$	$2U_2'$ $2U_2'Q$
E_1'	2	-2	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	0
E_2'	2	-2	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	0

T'	E	Q	$4C_3$	$4C_3^2$	$4C_3Q$	$4C_3^2Q$	$3C_2$ $3C_2Q$
E'	2	-2	1	-1	-1	1	0
G' {	2	-2	ε	$-\varepsilon^2$	$-\varepsilon$	ε^2	0
	2	-2	ε^2	$-\varepsilon$	$-\varepsilon^2$	ε	0

O'	E	Q	$4C_3$ $4C_3^2Q$	$4C_3^2$ $4C_3Q$	$3C_4^2$ $3C_4^2Q$	$3C_4$ $3C_4^3Q$	$3C_4^3$ $3C_4Q$	$6C_2$ $6C_2Q$
E_1'	2	-2	1	-1	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0
E_2'	2	-2	1	-1	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0
G'	4	-4	-1	1	0	0	0	0

実の指標をもつ2価1次元[1]表現があれば，複素共役関数ψ^*が同じ表現に従って変換されるけれども，なおψとψ^*とが1次独立であるということができる．他方，複素共役な波動関数は同一エネルギー準位に属するので，物理的応用ではこのような表現は2倍にされる必要があることがわかる．

種々の物理量fの行列要素に対する選択則を求める方法に関して，§97で述べられたすべては半整数のスピンを持つ状態に対しても役に立つ．ただ（エネルギーについて）対角の行列要素に対してわずかばかりの変更をするだけである．§97の終りに述べられている考察を繰り返し，ここでは (60.2)，(60.3) を考慮して，もしも量fが時間反転に対して偶あるいは奇ならば，求める選択則は表現$D^{(\alpha)}$自身の積の，それぞれ反対称和$\{D^{(\alpha)2}\}$あるいは対称和$[D^{(\alpha)2}]$を考察すればよいことがわかる．これは§97で定式化された，整数スピンを持つ系に対して成り立つ選択則とくらべると逆である[2]．

問　題

立方対称性$\boldsymbol{O}$[3]をもつ場の中に置かれた（全角運動量Jが与えられた）原子準位がどのように分裂するかを決定せよ．

解　角運動量Jおよび種々のM_Jの値をもつ原子の状態の波動関数は，公式 (98.3) で決定される指標をもつ群$\boldsymbol{O}$の$(2J+1)$-次元可約表現をつくる．この表現を既約部分に分解し（Jが整数のときは1価，Jが半整数のときは2価である），それにより求める分裂を得る（§96参照）．Jの始めのいくつかの値に対応する表現の既約部分を列挙しよう：

$J=0$	$1/2$	1	$3/2$	2	$5/2$	3
A_1	E_1'	F_1	G'	$E+F_2$	$E_2'+G'$	$A_2+F_1+F_2$

1) 奇数のnをもつ群C_n'にはこのような表現がある；これの指標は$\chi(C_n^k)=(-1)^k$である．

2) この規則についての注意として，2価表現の場合には恒等表現は，表現自身の対称積にではなく反対称積に含まれることを指摘しよう．2次元の2価表現では積$\{D^{(\alpha)2}\}$は単に恒等表現に一致してしまう．

3) たとえば，結晶格子中の原子について考えればよい．考察されている問題の外場の対称性の群の中に，対称中心があるかないかは意味がないことに注意せよ．なぜかというと，反転に対する波動関数の振舞い（準位が偶か奇か）は角運動量Jと関係がないからである．

第13章　多原子分子

§100. 分子振動の分類

群論を多原子分子に適用すると，分子の電子項，すなわち与えられた核の配置に対するエネルギー準位の分類に関する問題がまず最初に解かれる．電子項は，考えている核の配置に対応する対称性の点群の既約表現によって分類される．しかしながら，この場合つぎのような明らかな事実を強調しなければならない；すなわち，このようにして得られた分類は，与えられた一定の核の配置に属している．そのわけは，核が移動すると，一般的にいって配置の対称性は破られるからである．ふつう，核の平衡位置に対応する配置について考えればよい．この場合，核の振動が小さければ分類は定まった意味をもちつづけるが，しかし振動が小さいとみなされないならば，分類はもはや意味を失う．

2原子分子ではこのような問題は起こらなかった．そのわけは，2原子分子の軸対称性はもちろん任意の核の変位に対して保存されるからである．同様の状況が3原子分子に対しても起こる．三つの核はいつも一平面上にあり，その平面は分子の対称面をなしている．したがって，この平面に関する3原子分子の電子項の分類（この平面での鏡映に関する波動関数の対称性または反対称性）はいつも可能である．

多原子分子の基底電子項に対しては経験則が成り立ち，それによると圧倒的多数の分子において基底電子状態の波動関数は完全な対称性をもつ（2原子分子に対してはこの規則をすでに§78で述べた）．いいかえると，その波動関数は分子の対称性の群のあらゆる要素に関して不変である．つまり波動関数は群の恒等既約表現に属する．

分子振動の研究に対して群論の方法を適用することはとくに重要である（E. Wigner, 1930）．この問題の量子力学的研究に先立って，分子振動の純粋に古典的な研究を行なう必要がある．そこでは，分子は相互作用をしているいくつ

かの粒子（核）からなる系とみなされる．

力学で知られているように（第I巻『力学』，§23，§24参照），（一直線上に並んでいない）N粒子からなる系は$3N-6$個の振動の自由度をもつ；自由度の総数$3N$のうち，三つは系全体としての併進運動，他の三つは回転運動に対応している[1]．微小振動をしている粒子系のエネルギーは次の形に書くことができる：

$$E=\frac{1}{2}\sum_{i,k} m_{ik}\dot{u}_i\dot{u}_k+\frac{1}{2}\sum_{i,k} k_{ik}u_iu_k. \tag{100.1}$$

ここでm_{ik}，k_{ik}は定係数，u_iは粒子の平衡位置からの変位ベクトルの成分である（添字i, kはベクトル成分と粒子の番号をともにあらわす）．量u_iの適当な1次変換により，(100.1)から系の併進運動および回転に対応する座標を消去することができ，また(100.1)における二つの2次形式が自乗の和に変換されるように，振動座標を選ぶことができる．運動エネルギーの表式におけるすべての係数が1となるようにこれらの座標を規格化すると，次の形の振動エネルギーを得る：

$$E=\frac{1}{2}\sum_{i,\alpha}\dot{Q}_{\alpha i}^2+\frac{1}{2}\sum_{\alpha}\omega_\alpha^2\sum_i Q_{\alpha i}^2. \tag{100.2}$$

振動座標$Q_{\alpha i}$は**基準座標**と呼ばれる；ω_αはそれに対応する独立な振動の振動数である．いくつかの基準座標に同一の振動数が対応することが起こり得る（このことを**多重振動数**という）；基準座標における添字αは振動数の番号に対応し，添字$i=1, 2, \cdots, f_\alpha$は同一の振動数に属する座標の番号をあらわす（f_αは振動数の**多重度**である）．

分子のエネルギーに対する式(100.2)は，対称変換に関して不変でなければならない．この意味は，分子の対称性の点群に属するあらゆる変換を行なっても（与えられた各αに対して）基準座標$Q_{\alpha i}$，$i=1, 2, \cdots, f_\alpha$は互いに1次変換され，その結果，自乗の和$\sum_i Q_{\alpha i}^2$は不変のままであるということである．いいかえると，分子振動の与えられた各固有振動数に属する基準座標は，分子の対称性の群のある既約表現をつくる；振動数の多重度が表現の次元(数)を決定

1)　もしも全粒子が一直線上に並んでいるとすると，振動の自由度の数は$3N-5$である（回転はこの場合全部で2座標に対応する．そのわけは線形分子のそれ自身の軸のまわりの回転を考えることは意味がないからである）．

する．§96でシュレーディンガー方程式の解の導出に当たって論じられたのと同一の考察により，既約性が導かれる．二つの異なる既約表現に対応する振動数が一致するということは起こりそうもない偶然である．ここで次に述べる注釈を加えなければならない．基準座標はそれ自身の物理的性質により実の量であるので，二つの複素共役の表現は，物理的に2倍の多重度をもつ一つの固有振動数に対応する．

このような考察により，分子の基準座標を具体的に決定するという複雑な問題を解かないで，分子の固有振動の分類を行なうことができる．そのためには，（下に示す方法により）すべての振動座標をいっしょに用いてつくられる表現を最初に見いださなければならない（この表現を**完全振動表現**ということにする）；この表現は可約であり，それを既約部分に分解することにより，固有振動数の多重度および対応する振動の対称性を決定することになる．この場合，同一の既約表現が完全表現の中に数回あらわれることが起こり得る；この意味は，同じ対称性の振動をもつ同じ多重度の，種々の振動数がいくつかあるということである．

完全表現を見いだすためには，表現の指標が基底関数の1次変換に関して不変であるという事実から出発する．したがって，指標の計算を行なうには，基底関数として基準座標でなく，単に核の平衡位置からの変位ベクトルの成分 u_i を用いればよい．

まず最初に明らかなことは，点群のある元Gの指標を計算するときには，与えられた対称変換に対して位置（より正確には平衡位置）が変わらないような核のみを考察しなければならない．実際に，もしも考えている回転または鏡映Gに対して，核1がそれまで他の同種核2によって占められていた新しい位置に変換されるならば，このことは操作Gに対して，核1の変位は核2の変位に変換されることを意味する．いいかえると，行列 G_{ik} のうち，この核（すなわちその変位 u_i）に対応する行の中には，あらゆる場合に対角要素が存在しない．ところが，操作Gによって平衡位置が変わらない核の変位ベクトルの成分は，それらの間のみで互いに変換されるので，それらは残りの核の変位ベクトルに対して独立とみなすことができる．

最初にある対称軸の回りの角 φ だけの回転 $C(\varphi)$ を考察しよう．u_x, u_y, u_z を

ある核の変位ベクトルの成分とし，これらの核の平衡位置はその軸上にあるので回転によって変化しないものとする．回転に対してこれらの変位ベクトル成分は，あらゆるふつうの（極性）ベクトルの成分と同じく．（z 軸を対称軸として）次式によって変換される：

$$u'_x = u_x \cos\varphi + u_y \sin\varphi,$$
$$u'_y = -u_x \sin\varphi + u_y \cos\varphi,$$
$$u'_z = u_z.$$

指標，すなわち変換行列の対角項の和は $1+2\cos\varphi$ である．もしも考えている軸上に全部で N_C 個の核が並んでいるならば，全指標は

$$N_C(1+2\cos\varphi) \tag{100.3}$$

となる．しかしながら，この指標は全部で $3N$ 個の変位 u_i の変換に対応している；したがって，分子全体としての併進および（小さい）回転の変換に対応する部分を分離しなければならない．併進は，分子の重心の変位ベクトル $\boldsymbol{U}$ によって決定される；したがって指標の対応する部分は $1+2\cos\varphi$ である．ところが分子全体としての回転は回転角のベクトル $\delta\boldsymbol{\Omega}$ により決定される[1]．ベクトル $\delta\boldsymbol{\Omega}$ は軸性ベクトルである；しかしながら座標系の回転に関して，軸性ベクトルは極性ベクトルと同じように振舞う．したがって，ベクトル $\delta\boldsymbol{\Omega}$ に対しても $1+2\cos\varphi$ の指標が対応する．だから全部で (100.3) から量 $2(1+2\cos\varphi)$ を差し引かなければならない．このようにして最後に，振動の完全表現における回転 $C(\varphi)$ の指標 $\chi(C)$ を得る：

$$\chi(C) = (N_C-2)(1+2\cos\varphi). \tag{100.4}$$

単位元 E の指標はもちろん，単に振動の自由度の総数に等しい：$\chi(E)=3N-6$（これは (100.4) から $N_C=N$, $\varphi=0$ と置いても得られる）.

同様にして，回転鏡映変換 $S(\varphi)$（z 軸のまわりに角度 φ だけ回転し，xy 面で鏡映する）の指標を計算しよう．この場合，ベクトルの変換は次式によってなされる：

---

1) よく知られているように，微小回転角はベクトル $\delta\boldsymbol{\Omega}$ とみなすことができて，その絶対値は回転角に等しく，方向は右ねじの規則に従って決められる方向を向いた回転軸に沿っている．このようにして定義されたベクトル $\delta\boldsymbol{\Omega}$ は，もちろん軸性である．

$$u_x' = u_x \cos\varphi + u_y \sin\varphi,$$
$$u_y' = -u_x \sin\varphi + u_y \cos\varphi,$$
$$u_z' = -u_z.$$

これには $(-1+2\cos\varphi)$ の指標が対応する．したがって，全部で $3N$ 個の変位 u_i によってつくられる表現の指標は，

$$N_S(-1+2\cos\varphi) \tag{100.5}$$

である．ここで N_S は操作 $S(\varphi)$ によって動かない核の数である（この数は明らかに，ゼロであるか1であるかのどちらかである）．重心の変位ベクトル $\boldsymbol{U}$ に対応する指標は $(-1+2\cos\varphi)$ である．ところがベクトル $\delta\boldsymbol{\Omega}$ についていえば，それは軸性ベクトルであるので，座標系の反転に対して変わらない；他方，回転鏡映変換 $S(\varphi)$ は次の形にあらわすことができる：

$$S(\varphi) = C(\varphi)\sigma_h = C(\varphi)C_2I = C(\pi+\varphi)I.$$

すなわち，これは角度 $\pi+\varphi$ だけ回転した後に反転することに等しい．したがって，ベクトル $\delta\boldsymbol{\Omega}$ に適用された変換 $S(\varphi)$ の指標は，ふつうのベクトルに適用された変換 $C(\pi+\varphi)$ の指標に等しく，これは $1+2\cos(\pi+\varphi)=1-2\cos\varphi$ である．和 $(-1+2\cos\varphi)+(1-2\cos\varphi)=0$ であるので，式 (100.5) は完全表現における回転鏡映変換 $S(\varphi)$ の求めている指標そのものであるという結果に到達する：

$$\chi(S) = N_S(-1+2\cos\varphi). \tag{100.6}$$

とくに，対称面での鏡映 $(\varphi=0)$ の指標は $\chi(\sigma)=N_\sigma$ であり，反転 $(\varphi=\pi)$ の指標は $\chi(I)=-3N_I$ である．

完全表現の指標 χ が決定されたあとには，その表現を既約表現に分解しさえすればよい．これは式 (94.16) により，§95 で求めた指標の表を用いてなされる（本節の問題参照）．

直線形分子の振動を分類するためには，群論を用いる必要はない．振動の自由度の総数は $3N-5$ である．振動のうちで，原子が一直線上にとどまるものと，それが満たされないものとを区別する必要がある[1]．N 粒子の直線に沿った運動に対する自由度の総数は N である；これらのうち1つは分子全体として

1) もしも分子がそれ自身の中心に関して対称ならば，振動の付加的な性質がさらに一つあらわれる．それについては本節の問題10参照．

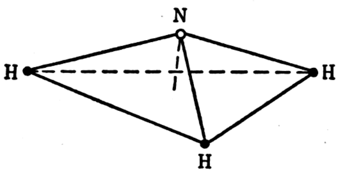
の併進に対応している．したがって，直線上に原子をとどめたままの振動の基準座標の数は $N-1$ である；一般的にいって，それらに対して $N-1$ 個の異なる固有振動数が対応する．残りの $(3N-5)-(N-1)=2N-4$ 個の基準座標は分子の直線性を破る振動に属する；それらに対して $N-2$ 個の異なる2重振動数が対応する（互いに垂直な二つの平面内の同じ振動に対応する二つの基準座標が各振動数に属する）[1]．

問　　題

1. NH_3 分子の基準振動の分類を行なえ（頂点にN原子をもち，底面のかどにH原子をもつ等辺ピラミッドをなしている．第41図）．

解　分子の対称性の点群は C_{3v} である．3回軸のまわりの回転は1原子（N）のみを固定したままで，対称面での鏡映は2原子（NおよびHの一つ）を固定したままである．公式（100.4），（100.6）により，完全表現の指標を得る：

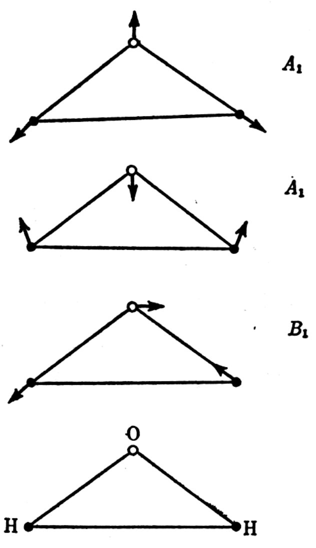
$$\begin{array}{ccc} E & 2C_3 & 3\sigma_v \\ \hline 6 & 0 & 2 \end{array}.$$



第 41 図

この表現を既約部分に分解すると，それは表現 A_1 および E をそれぞれ2度含んでいることがわかる．このようにして，分子の完全対称性を保存する A_1 型の振動（いわゆる完全対称振動）に対応する二つの1重振動数，および表現 E によって互いに変換される基準座標に対応する二つの2重振動数がある．

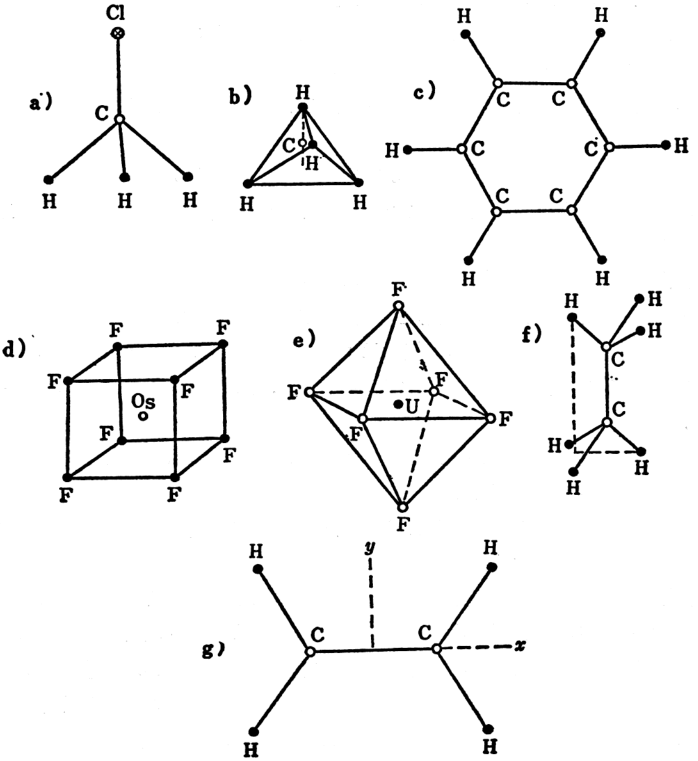
2. H_2O 分子に対して前問と同じことを行なえ（第42図）．



第 42 図

解　対称性の群は C_{2v} である．変換 C_2 はO原子を不変のままに，変換 σ_v（分子の対称面での鏡映）は3原子すべてを不変のままに，鏡映 σ_v' はO原子

1）群 $C_{\infty v}$ の既約表現をあらわす記号を用いれば（§98参照），A_1 型の振動が $N-1$ 個あり，E_1 型の振動が $N-2$ 個あるということができる．



第 43 図

のみを不変のままとする．完全表現の指標は次のようになる：

E	C_2	σ_v	σ_v'
3	1	3	1.

この表現は既約表現 $2A_1$，$1B_1$ に分解される．すなわち二つの完全対称振動および表現 B_1 によって決定される対称性をもつ一つの振動がある；すべての振動数は1重である（第42図には対応する基準振動が示されている）．

3.　CH_3Cl 分子に対して前問と同じことを行なえ（第43図 a）．

解　分子の対称性の群は C_{3v} である．前問と同じ方法により，三つの完全対称振動 A_1 および三つの2重の E 型振動が得られる．

4.　CH_4 分子に対して前問と同じことを行なえ（C 原子は正四面体の中心にあり，H 原子はその頂点にある．第43図 b）．

解　分子の対称性は T_d である．振動は $1A_1$，$1E$，$2F_2$ である．

5.　C_6H_6 分子に対して前問と同じことを行なえ（第43図 c).

解　分子の対称性は $\boldsymbol{D}_{6h}$ である．振動は次のものがある：$2A_{1g}$，$1A_{2g}$，$1A_{2u}$，$1B_{1g}$，$1B_{1u}$，$1B_{2g}$，$3B_{2u}$，$1E_{1g}$，$3E_{1u}$，$4E_{2g}$，$2E_{2u}$.

6.　OsF_8 分子に対して前問と同じことを行なえ（Os 原子は立方体の中心にあり，F 原子はその頂点にある．第43図 d).

解　分子の対称性は $\boldsymbol{O}_h$ である．振動は：$1A_{1g}$，$1A_{2u}$，$1E_g$，$1E_u$，$2F_{1u}$，$2F_{2g}$，$1F_{2u}$.

7.　UF_6 分子に対して前問と同じことを行なえ（U 原子は正八面体の中心にあり，F 原子はその頂点にある．第43図 e).

解　分子の対称性は $\boldsymbol{O}_h$ である．振動は：$1A_{1g}$，$1E_g$，$2F_{1u}$，$1F_{2g}$，$1F_{2u}$.

8.　C_2H_6 分子に対して前問と同じことを行なえ（第43図 f).

解　分子の対称性は $\boldsymbol{D}_{3d}$ である．振動は：$3A_{1g}$，$1A_{1u}$，$2A_{2u}$，$3E_g$，$3E_u$.

9.　C_2H_4 分子に対して前問と同じことを行なえ（第43図 g；原子はすべて同一平面上にある).

解　分子の対称性は $\boldsymbol{D}_{2h}$ である．振動は：$3A_{1g}$，$1A_{1u}$，$2B_{1g}$，$1B_{1u}$，$2B_{3u}$，$1B_{2g}$，$2B_{2u}$（座標軸のとり方は，図に示した通りである).

10.　N 原子からなる直線形分子で，しかもそれ自身の中心に関して対称なものに対して，前問と同じことを行なえ.

解　本文で考察された直線形分子の振動の分類に加えて，中心での反転に関する振舞いの分類をつけ足さなければならない．N が偶数または奇数の場合を区別する必要がある．もしも N が偶数ならば $(N=2p)$，分子の中心には原子がない．分子の一方の半分の p 原子に直線に沿った独立な変位を与え，残りの p 原子に大きさが等しく方向が反対の変位を与えると，原子を直線上にとどめたままの p 個の振動は中心に関して対称であり，この型の残りの $(2p-1)-p=p-1$ 個の振動は中心に関して反対称である．つぎに p 原子は，原子が直線上にとどまらない $2p$ 個の運動の自由度をもつ．対称に配置された原子に，大きさが等しく方向が反対の変位を与えると，$2p$ 個の対称な振動が得られる；この数のうち分子回転に対応する 2 を差し引かなければならない．このようにして，原子を直線から離し，中心に関して対称な振動の $p-1$ 個の 2 重振動数が得られ，また，同じ数 $((2p-2)-(p-1)=p-1)$ の反対称の振動数が得られる．群の既約表現の記号 $\boldsymbol{D}_{\infty h}$（473 ページ参照）を用いると，$A_{1g}$ 型の振動が p 個あり，A_{1u}，E_{1g}，E_{1u} 型の振動が $(p-1)$ 個ある.

もしも N が奇数ならば $(N=2p+1)$，同様の議論により，A_{1g}，A_{1u}，E_{1u} 型の振動が p 個，E_{1g} 型の振動が $(p-1)$ 個得られる.

§ 101. 振動エネルギー準位

量子力学的考察によれば，分子の振動エネルギーは次のハミルトニアンの固

有値により決定される：

$$\hat{H}^{(v)}=\frac{1}{2}\sum_{\alpha}\sum_{i=1}^{f_\alpha}\left(\hat{P}_{\alpha i}^2+\omega_\alpha^2 Q_{\alpha i}^2\right). \tag{101.1}$$

ここで，$\hat{P}_{\alpha i}=-i\hbar\partial/\partial Q_{\alpha i}$ は基準座標 $Q_{\alpha i}$ に対応する運動量演算子である．このハミルトニアンは独立な項（括弧の中の式）の和に分解されるので，エネルギー準位は和

$$E^{(v)}=\hbar\sum_{\alpha}\omega_\alpha\sum_{i}\left(v_{\alpha i}+\frac{1}{2}\right)=\sum_{\alpha}\hbar\omega_\alpha\left(v_\alpha+\frac{f_\alpha}{2}\right) \tag{101.2}$$

であらわされる．ここで，$v_\alpha=\sum_{\alpha} v_{\alpha i}$，$f_\alpha$ は振動数 ω_α の多重度である．波動関数は，線形調和振動子に対応する波動関数の積であらわされる：

$$\psi=\prod_{\alpha}\psi_\alpha. \tag{101.3}$$

ここで

$$\psi_\alpha=\text{const}\cdot\exp\left(-\frac{1}{2}c_\alpha^2\sum_{i}Q_{\alpha i}^2\right)\prod_{i}H_{v_{\alpha i}}(c_\alpha Q_{\alpha i}). \tag{101.4}$$

H_v は第 v 次のエルミート多項式をあらわし，$c_\alpha=\sqrt{\omega_\alpha/\hbar}$ である．もしも振動数 ω_α の中に多重振動数があると，振動エネルギー準位は，一般的にいって縮退している．エネルギー（101.2）は和 $v_\alpha=\sum_{i} v_{\alpha i}$ にのみ依存している．したがって準位の縮退度は，数 $v_{\alpha i}$ から数 v_α の与えられた組をつくる方法の数に等しい．一つの数 v_α に対してそれは[1]：

$$\frac{(v_\alpha+f_\alpha-1)!}{v_\alpha!(f_\alpha-1)!}.$$

したがって全縮退度は：

$$\prod_{\alpha}\frac{(v_\alpha+f_\alpha-1)!}{v_\alpha!(f_\alpha-1)!}. \tag{101.5}$$

2重振動数に対してはこの積の因子は $v_\alpha+1$ となり，3重振動数に対しては $\frac{1}{2}(v_\alpha+1)(v_\alpha+2)$ となる．

注意しなければならないことは，この縮退は純粋な調和振動を考察する限りにおいてのみ起こるということである．ハミルトニアンにおいて基準座標のより高次の項を考慮すると（非調和振動），縮退は，一般的にいって，必ずしも完全にではないが解かれる（この点についてより詳しくは§104参照）．

1）これは，v_α 個のボールを f_α 個のかごに分配する方法の数である．

縮退している同一の振動項に属する波動関数 (101.3) は，分子の対称性の群のある（一般的にいって，可約）表現を与える．しかしながら，異なる振動数に属する関数は互いに独立に変換される．したがって，全関数 (101.3) によって与えられる表現は，関数 (101.4) によって与えられる表現の積であるから，後者のみを考察すれば十分である．

(101.4) における指数関数因子はあらゆる対称変換に関して不変である．エルミート多項式においては，与えられた各次数の項は互いに同じ次数の項にのみ変換される（対称変換は明らかに各項の次数を変えない）．他方，各エルミート多項式はその最高次の項によって完全に決定されるので，次のように書くことができる：

$$\prod_{i=1}^{f_\alpha} H_{v_{\alpha i}}(c_\alpha Q_{\alpha i}) = \mathrm{const}\cdot Q_{\alpha 1}^{v_{\alpha 1}} Q_{\alpha 2}^{v_{\alpha 2}} \cdots Q_{\alpha f_\alpha}^{v_{\alpha f_\alpha}} + \text{より低次の項}.$$

つまり最高次の項のみを考察すれば十分である．

和 $v_\alpha = \sum_i v_{\alpha i}$ が同じ値をもつ関数は同一の項に属する．したがって，v_α 個の量 $Q_{\alpha i}$ の積によって与えられる表現が得られる；これは，量 $Q_{\alpha i}$ によって与えられる既約表現それ自身の v_α 回の対称積に他ならない(§ 94 参照)(L. Tisza, 1933).

1次元表現に対して，それ自身を v 回掛けた対称積の指標は単に

$$\chi_v(G) = [\chi(G)]^v$$

である[1]．2次元および3次元表現に対しては，次のような数学的方法を用いるのが便利である[2]．既約表現の基底関数の自乗の和は，あらゆる対称変換に関して不変である．したがって，基底関数を2次元および3次元ベクトルの成分と形式的にみなすことができ，対称変換をこれらのベクトルに作用するある回転（または鏡映）とみなすことができる．強調すべきことは，これらの回転および鏡映は，一般的にいって実際の対称変換と無関係であり，（群の与えられた各元 G に対して）考えている特定の表現にも依存している．

2次元表現をより詳しく考察しよう．$\chi(G)$ を，与えられた2次元表現における群のある元の指標であるとし，$\chi(G) \neq 0$ であるとする．平面内の角度 φ だ

1) ここではやっかいな記号 $[\chi^v](G)$ のかわりに記号 $\chi_v(G)$ を用いる．

2) この問題に適用されたのはア・エス・カンパニェーツ A.C.Компанеец (1940)によってである．

けの回転に対する2次元ベクトルの成分 x, y の変換行列の対角要素の和は $2\cos\varphi$ である．いま

$$2\cos\varphi=\chi(G) \tag{101.6}$$

と置くと，考えている既約表現において元 G に形式的に対応する回転角を見いだす．それ自身を v 回掛け合わせた表現の対称積は，$v+1$ 個の量 x^v, $x^{v-1}y, \cdots$, y^v によりつくられる基底をもつ表現である．この表現の指標は

$$\chi_v(G)=\frac{\sin(v+1)\varphi}{\sin\varphi} \tag{101.7}$$

となる[1]．$\chi(G)=0$ の場合は特別の考察を必要とする．そのわけは，ゼロの指標は角度 $\pi/2$ だけの回転にも対応し，また鏡映にも対応するからである．もしも $\chi(G^2)=-2$ ならば，角度 $\pi/2$ だけの回転を扱うことになり，$\chi_v(G)$ に対しては次式を得る：

$$\chi_v(G)=-\frac{1+(-1)^v}{2}. \tag{101.8}$$

ところが，もしも $\chi(G^2)=2$ ならば，$\chi(G)$ は鏡映（すなわち $x\to x$, $y\to -y$ の変換）の指標とみなされなければならない；すると

$$\chi_v(G)=\frac{1+(-1)^v}{2}. \tag{101.9}$$

同様にして，3次元表現の対称積に対する式を得ることができる．与えられた表現における群の元に形式的に対応する回転（または鏡映）を見いだすことは，第7表を用いて容易になされる．これは，考えている表現によって座標が変換される同型群の中の，与えられた $\chi(G)$ に対応する変換である．したがって，群 $\boldsymbol{O}$ および $\boldsymbol{T}_d$ の表現 F_1 に対しては群 $\boldsymbol{O}$ から変換をとらなければならず，表現 F_2 に対しては群 $\boldsymbol{T}_d$ から変換をとらなければならない．われわれは，ここで指標 $\chi_v(G)$ の対応する式を導くことにこれ以上とどまらないことにする．

§ 102. 分子の対称配置の安定性

核の対称配置に対して，もしも対称性の群の既約表現の中に1よりも大きい

---

1) 計算のためには次の形の基底関数を選ぶと便利である：

$$(x+iy)^v,\ (x+iy)^{v-1}(x-iy),\ \cdots,\ (x-iy)^v.$$

すると回転行列は対角的となり，対角要素の和は次の形をもつ：

$$e^{iv\varphi}+e^{i(v-2)\varphi}+\cdots+e^{-iv\varphi}.$$

次元をもつ表現があるならば，分子の電子項は縮退していることがあり得る．問題を次のように設定しよう；すなわち，このような対称配置は分子の安定な平衡配置であり得るか．この場合，スピンの影響を（もしそれが一般にあるとしても）まったく無視するであろう．それは，多原子分子において，一般的にいってとるに足りないからである．したがって，ここで問題にする電子項の縮退は，スピンに関係のない軌道縮退のみである．

与えられた配置が安定であるためには，核間距離の関数としての分子エネルギーが，核のこの配置に対して極小をもたなければならない．この意味は，核の微小変位に対するエネルギーの変化は，変位に関して1次の項を含んではならないということである．

分子の電子状態のハミルトニアンを $\hat{H}$ とし，核間距離をパラメーターとみなそう．与えられた対称配置に対するこのハミルトニアンを $\hat{H}_0$ とあらわすことにしよう．核の微小変位を決定する量として基準振動座標 $Q_{\alpha i}$ を用いることができる．$\hat{H}$ を $Q_{\alpha i}$ のベキで展開すると次の形を得る：

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\sum_{\alpha,i} V_{\alpha i}Q_{\alpha i}+\sum_{\alpha,\beta,i,k} W_{\alpha i,\beta k}Q_{\alpha i}Q_{\beta k}+\cdots. \tag{102.1}$$

展開係数 $V, W, \cdots$ は電子座標のみの関数である．対称変換に対して量 $Q_{\alpha i}$ は互いに変換される．(102.1) の中の和は，この場合，同じ形をもつ別の和に変わる．したがって，われわれは対称変換を形式的に，$Q_{\alpha i}$ を不変にしたままのこれらの和の中の係数の変換とみなすことができる．この場合とくに，（与えられたいかなる α に対しても）係数 $V_{\alpha i}$ は，対応する座標 $Q_{\alpha i}$ が変換されるのと同じ対称性の群の表現によって変換される．これは次のことから直接導かれる．すなわち，あらゆる対称変換に関してハミルトニアンは不変であるため，それの展開のあらゆる次数の項も，またとくに展開の1次の項も，同様に不変でなければならないからである[1]．

（対称配置に対する）ある縮退した電子項 E_0 を考察しよう．分子の対称性を破る核の変位は，一般的にいって項の分裂をひき起こす．分裂の大きさは，展

1) 厳密にいうと，量 $V_{\alpha i}$ は $Q_{\alpha i}$ が変換される表現の複素共役の表現によって変換されなければならない．しかしながらすでに示したように，もしも二つの複素共役の表現が互いに同じでないならば，それらはいっしょにして2倍の大きさの次元をもつ一つの表現と物理的にみなさなければならない．したがってこの注釈は重要でない．

開式（102.1）の1次の項の行列要素

$$V_{\rho\sigma}=\sum_{\alpha,i} Q_{\alpha i}\int \psi_\rho V_{\alpha i}\psi_\sigma dq \qquad (102.2)$$

からつくられる永年方程式により，核の変位に関して1次の項までの精度で決定することができる．ここで ψ_ρ, ψ_σ は与えられた縮退項に属する電子状態の波動関数である（したがってこれらの関数は実に選ばれる）．対称配置安定性は，Q に関して1次の分裂がゼロとなること，つまり永年方程式のあらゆる根が恒等的にゼロとならなければならないことを要求する．このことはあらゆる行列 $V_{\rho\sigma}$ もゼロとならなければならないことを意味する．この場合もちろん，われわれは分子の対称性を破る基準振動のみを考察しなければならない．つまり（群の恒等表現に対応する）完全対称振動を除外しなければならない．

$Q_{\alpha i}$ は任意であるので，行列要素（102.2）がゼロとなるのは，積分

$$\int \psi_\rho V_{\alpha i}\psi_\sigma dq \qquad (102.3)$$

がすべてゼロとなる場合においてのみである．

電子波動関数 ψ_ρ が変換される既約表現を $D^{(el)}$ とし，量 $V_{\alpha i}$ が変換される既約表現を D_α としよう；すでに述べたように表現 D_α は，対応する基準座標 $Q_{\alpha i}$ が変換される表現と同じものである．§97の結果に従えば，積分（102.3）がゼロでないためには，積 $[D^{(el)2}]\times D_\alpha$ がそれ自身の中に恒等表現を含むか，または同じことだが $[D^{(el)2}]$ がそれ自身の中に D_α を含むかでなければならない．それ以外の場合には，積分はすべてゼロとなる．

このようなわけで，もしも表現 $[D^{(el)2}]$ がそれ自身の中に分子振動を特徴づける既約表現 D_α を（恒等表現を除いて）一つも含まないならば，対称配置は安定である．縮退していない電子状態に対してこの条件はいつも満たされている．それは，1次元表現のそれ自身との対称積は恒等表現であるからである．

例として CH_4 型の分子を考察しよう．そこでは1原子 (C) は正四面体の中心にあり，4原子 (H) はその頂点にある．このような配置は対称性 T_d をもつ．縮退した電子項は，この群の表現 E, F_1, F_2 に対応する．分子は一つの基準振動 A_1（完全対称振動），一つの2重振動 E および二つの3重振動 F_2 をもつ（§100，問題4参照）．表現 E, F_1, F_2 のそれ自身との対称積は次の通りである：

$$[E^2]=A_1+E, \qquad [F_1^2]=[F_2^2]=A_1+E+F_2.$$

これらの各式は表現 E, F_2 のうちの少なくとも一つを含んでおり，したがって，考察している正四面体配置は，縮退した電子状態に対して不安定となることがわかる．

この結果はヤーン-テラーの定理と呼ばれるところの一般的規則をなしている（H. A. Jahn, E. Teller, 1937）．核の対称配置のあらゆる可能な型の（上述と同様の）研究によれば，縮退した電子状態に対して，核のあらゆる対称配置は（一直線上の配置だけを除いて）不安定である．この不安定性の結果として，核の配置の対称性が破られるように核が移動し，項の縮退が完全に解ける．とくに（非直線形）対称分子の基底電子項は，縮退のない項でしかあり得ないということができる[1]．

すでに述べたように，直線形分子のみが例外である，このことは群論を用いなくても容易にわかる．分子軸から離れる核の変位は，ξ-および η-成分をもつふつうのベクトルであらわされる（軸 ζ は分子軸の方向を向いている）．§87で見たように，このようなベクトルは，軸のまわりの角運動量 Λ が1だけ変わる遷移に対してのみ行列要素をもつ．他方，直線形分子の縮退した項には，軸のまわりの角運動量 Λ および $-\Lambda$ をもつ状態が対応する（ここで $\Lambda \geqq 1$）．それらの状態間の遷移は少なくとも2だけの角運動量の変化を伴い，したがって行列要素はあらゆる場合にゼロとなる．このようなわけで，分子中の核の直線形配置は縮退した電子状態に対しても安定となることができるのである．

この定理の建設的な一般的証明は次のような考察に基づいている（E. Ruch, 1957）．

核の配置の対称性に関連した電子状態の縮退は，少なくとも一つの回転軸（C_n）または鏡映回転軸（S_n）（$n>2$ の次数）を含むような分子の対称性の点群の中にのみ存在することができる．このような場合，互いに縮退している状態の波動関数（つまり対応する表現 $D^{(el)}$ の基底関数）の中には，電子密度 $\rho=|\psi|^2=\psi^2$ がこの軸のまわりの回転に対して不変でないような波動関数が少なく

1）それ自身の対称性のために縮退している電子状態における対称性の崩壊に関する物理的な考えはランダウによるものである(1934)．ヤーンとテラー(1937)は分子中の核の対称配置のあらゆる可能な型をとりあげて，上に示した方法でそれらの各々を研究して，この定理を証明した．

とも一つは存在する．電子密度がこの軸に関して対称でないのと同様に，電子によって作られる電場も対称でない．同時にまた（非直線形）分子には同一軸上になく，回転 C_n（または S_n）によって互いにその位置を入れ変える等価な核が存在する．したがって等価な核は，電場に関して等価でない点に存在することになる．しかしながら場の対称性によって要求されない荷電粒子の平衡配置の等価性は，ありそうもない偶然によってのみ実現されるという意味で，不可能である．

この定理の系統的な証明は，このような物理的状況を数学的に具体化したものである．この証明がどのようなものかを示そう（E. Ruch, A. Schönhofer, 1965)．

（非直線形分子において）分子の《中心》に存在せず（つまりその対称群の変換の不動点に存在せず）また対称主軸があったとしても[1]その上に存在しないある核を考察しよう（それを a と名づける)．核 a を不動とするような分子のあらゆる対称変換を $\boldsymbol{H}$ としよう． $\boldsymbol{H}$ は分子の全対称群 $\boldsymbol{G}$ の部分群の一つであり，点群 C_1, C_s, C_n, C_{nv} の一つでもある．$\boldsymbol{H}$ に含まれない $\boldsymbol{G}$ の中の変換は核 a をそれと等価な他の核 $a', a'', \cdots$ に移動させる．このような組の核の数を s としよう． 部分群 $\boldsymbol{H}$ の位数は g/s である． ここで g は全体の群 $\boldsymbol{G}$ の位数である（すなわち s は群 $\boldsymbol{G}$ の中の部分群 $\boldsymbol{H}$ の位数である)[2]．

数 s は明らかに $s\geqslant 3$ である．なぜならば（すでに上で述べたように）1次元以上の既約表現 $D^{(el)}$ が存在するためには，2次以上の高次の対称軸が少なくとも一つは存在することが必要であり，条件により核 a はその軸の上には存在しない．

群 $\boldsymbol{G}$ の表現 $D^{(el)}$ は，より低い対称性の群 $\boldsymbol{H}$ に関して一般に可約である．群 $\boldsymbol{H}$ の既約表現を用いてそれを展開すると1次元の表現が得られると仮定し，それを $d^{(el)}$ と呼ぼう． それは表現 $D^{(el)}$ の基底関数の一つである電子波動関数 ψ によって与えられる． 表現 $d^{(el)}$ は1次元であるので，自乗 $\rho=\psi^2$ は $\boldsymbol{H}$ のあらゆる変換に関して不変であり，この群の恒等既約表現を与える．

1）主軸とは（立方対称群および正20面体対称群以外の対称群にあるとき），$n>2$ の位数の C_n または S_n 軸を意味している．

2）群 $\boldsymbol{G}$ のあらゆる要素は s 個の部分集合 $\boldsymbol{H}, G'\boldsymbol{H}, G''\boldsymbol{H}, \cdots$ に分けられる．ここで $G', G'', \cdots$ はそれぞれ核 a を $a', a'', \cdots$ に移動させる群要素である．

群 $\boldsymbol{H}$ のこのような（恒等）表現は，次のような原子 a の変位 Q_a の一つを基底にとることによって得られる．すなわち分子の中心から核 a に至る動径ベクトルに沿った方向への変位である．

ここでこの変位に群 $\boldsymbol{G}$ のあらゆる操作をほどこすと，この群の（一般的に言って可約な）表現の基底が得られる．その表現を D_Q と名づけよう．$\boldsymbol{H}$ に含まれない $\boldsymbol{G}$ の中のあらゆる変換は，変位 Q_a を他の $s-1$ 個の等価な核 $a', a'', \cdots$ のうちの一つの変位に変え，また異なる核の変位はもちろん1次独立であるから，D_Q の次元は s となる．このとき D_Q の基底をなしている変位 $Q_a, Q_{a'}, \cdots$ は，分子全体としての純粋な移動にもまた純粋な回転にももちろん対応することができない．三つまたはそれ以上の等価な核が存在するとき，それらの動径変位からこのような移動や回転を作ることはできないからである．

このような方法で，関数 $\rho=\psi^2$ に群 G のあらゆる変換を行なうと群 $\boldsymbol{G}$ の表現が得られる．その表現を D_ρ と呼ぼう．D_ρ の次元は s であるか，あるいはそれよりも小さいかもしれない．なぜならば s 個の関数 $\rho, G'\rho, G''\rho, \cdots$ すべてが1次独立であると考えるべき明白な理由はないからである．しかしながら，もしも表現 D_ρ が D_Q と同じでないにしても，あらゆる場合に D_ρ は D_Q の中に含まれると言うことができる[1)]．それだけでなく D_ρ は恒等表現ではない．なぜならば自乗 ψ^2 はあらゆる群 $\boldsymbol{G}$ に関して明らかに不変ではないからである（不変であるのは1次元よりも大きい次元をもつ既約表現 $D^{(el)}$ のすべての基底関数の自乗の和だけである）．

このようにして得られた表現 D_Q および D_ρ の性質は，要求される結果をただちに与える．すなわち，D_Q は全振動表現の部分であり，D_ρ は表現 $[D^{(el)2}]$ の部分で，恒等表現を含んでいない．したがって，D_ρ が D_Q に含まれるという事実は，当然証明されるように $[D^{(el)2}]$ が非恒等振動表現 D_α の少なくとも一つをそれ自身に含んでいることを意味している．

---

1)　このことは一般的に次のことを意味している．部分群 $\boldsymbol{H}$ の（f 次元の）表現が基底関数の異なる集合によって作られるものとし，またこれらの集合のうちの一つに，それに群 $\boldsymbol{G}$ のあらゆる変換をほどこすと群 $\boldsymbol{G}$ の sf 次元の表現が得られるものとしよう（ここで s は群 $\boldsymbol{G}$ の中の部分群 $\boldsymbol{H}$ の位数である）．すると関数の集合（複数）のうちの任意の他の集合（単数）から上と同じ方法で作られる群 $\boldsymbol{G}$ の表現は，最初の表現に等しいか，あるいはそれに含まれるかのどちらかであると言うことができる．このことの厳密な証明は次の論文にある．E. Ruch, A. Schönhofer, Theoretica Chimica Acta, **3**, 291 (1965).

しかしながら上の議論では，表現 $D^{(el)}$ を部分群 $\boldsymbol{H}$ の既約表現に分解したものの中には1次元表現があることを仮定している．この仮定は圧倒的に多くの場合に正しい．たとえば，$\boldsymbol{H}=\boldsymbol{C}_1, \boldsymbol{C}_s, \boldsymbol{C}_2, \boldsymbol{C}_{2v}$ の場合には，このことは明らかに正しい（なぜならばこれらの群のあらゆる既約表現は1次元表現だからである）．また $\boldsymbol{H}=\boldsymbol{C}_n, \boldsymbol{C}_{nv},\ n>2$ で $D^{(el)}$ の次元が奇数であるならば，このことは明らかに正しい（なぜならば群 $\boldsymbol{C}_n,\ \boldsymbol{C}_{nv}$ は1次元および2次元の既約表現しか含んでいないからである）．点群の既約表現の指標の表を考察すればわかるように，例外は立方群 $\boldsymbol{G}=\boldsymbol{O}, \boldsymbol{T}_d, \boldsymbol{O}_h$ の部分群 $\boldsymbol{H}=\boldsymbol{C}_3, \boldsymbol{C}_{3v}$ に関する2次元表現である．

群 $\boldsymbol{G}=\boldsymbol{O}$ および部分群 $\boldsymbol{H}=\boldsymbol{C}_3$ の場合をとくに考察しよう（このことは表現の記号に影響をおよぼすにすぎない）．二つの電子関数 ψ_1, ψ_2 は群 $\boldsymbol{O}$ の表現 $D^{(el)}=E$ であるとする．同じ関数は部分群 $\boldsymbol{C}_3$ の表現 $d^{(el)}=E$ でもある．積 $\psi_1^2, \psi_2^2, \psi_1\psi_2$ で与えられる部分群 $\boldsymbol{C}_3$ の表現は $[E^2]=A+E$ である．部分群 $\boldsymbol{C}_3$ の同様な表現が，基底としての核 a の任意の変移ベクトル $\boldsymbol{Q}_a$ の3成分に関して得られる．群 $\boldsymbol{O}$ の表現 D_ρ はこの場合 $D_\rho=[D^{(el)2}]=A_1+E$ である．それは分子全体としての並進または回転のベクトルに対応する表現 $\boldsymbol{F}_2$ を含まないが，（恒等表現と並んで）非恒等表現をも含んでいる．したがって，（前と同じ理由によって）D_ρ が（この場合 $3s$ 次元の）表現 D_Q に含まれるという事実は，この場合にも分子が不安定であることを示している[1]．

本節の最初に注意しておいたように，今までのすべての記述において電子状態の縮退は純粋に軌道に起源をもつことを想定していた．しかしながら，ヤーン－テラーの定理はスピン－軌道およびスピン－スピン相互作用を考慮しても成立することを述べておこう．ただし異なる点は，半整数スピンをもつ（非直線形）分子においては，§60で証明した一般的な定理に一致して，クラマースの二重縮退が不安定になることはないということである．この後者の場合に対応するものは二重点群の二価の2次元既約表現である．この場合に不安定性が存在しないことは，次のような形式的な考察からわかる．二価表現 $D^{(el)}$ の場合に行列要素 (102.3) の選択規則を決めるためには，対称積ではなく，反対称

1）もう一つの例外的な場合は，正二十面体群の4次元表現である．この場合も同様に考察されて，同一の結果に到達する．

積 $\{D^{(el)2}\}$ を考察しなければならない (§99を見よ). しかしながら，次元数2をもつあらゆる二価の既約表現に対して，この積は恒等表現に一致し，明らかに分子の完全対称でない何らかの振動に対応する表現を含んでいない.

§103. こまの回転の量子化

多原子分子の回転準位の研究は，回転と同時に振動をも考察しなければならないために，しばしば困難になる. 手始めの問題として，剛体としての分子，つまり《固く結びつけられた》原子をもつ分子（**こま**）の回転を考察しよう.

こまの三つの慣性軸の方向を向いた軸をもつ座標系を $\xi\eta\zeta$ とし，この座標系はこまとともに回転しているものとする. 対応するハミルトニアンを得るには，エネルギーに対する古典的表式において，それの回転の角運動量成分 J_ξ, J_η, J_ζ を対応する演算子に置きかえればよい. すなわち

$$\hat{H}=\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{\hat{J}_\xi^2}{I_A}+\frac{\hat{J}_\eta^2}{I_B}+\frac{\hat{J}_\zeta^2}{I_C}\right). \tag{103.1}$$

ここで I_A, I_B, I_C はこまの主慣性モーメントである.

回転している座標系における角運動量成分の演算子 $\hat{J}_\xi$, $\hat{J}_\eta$, $\hat{J}_\zeta$ に対する交換則は明らかでない. それは，交換則のふつうの求め方は静止座標系における成分 $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ に対するものであるからである. しかしながら，それは次の式を用いると容易に求められる：

$$(\hat{\boldsymbol{J}}\boldsymbol{a})(\hat{\boldsymbol{J}}\boldsymbol{b})-(\hat{\boldsymbol{J}}\boldsymbol{b})(\hat{\boldsymbol{J}}\boldsymbol{a})=-i\hat{\boldsymbol{J}}[\boldsymbol{ab}]. \tag{103.2}$$

ここで $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ は考えている剛体を特徴づける二つの任意のベクトルである（それは互いに可換である）. この式は容易に証明できる. そのためには，静止座標系 xyz において，角運動量の成分どうし，およびそれと任意のベクトル成分との一般的な交換則を用いて，等式の左辺の計算を行なえばよい.

いま $\boldsymbol{a}$ および $\boldsymbol{b}$ を，ξ および η を向いた単位ベクトルであるとしよう. すると $[\boldsymbol{ab}]$ は ζ 軸を向いた単位ベクトルであり，(103.2) により

$$\hat{J}_\xi\hat{J}_\eta-\hat{J}_\eta\hat{J}_\xi=-i\hat{J}_\zeta \tag{103.3}$$

となる. 同様にして，さらに二つの関係式が得られる. このようにして，回転座標系における角運動量成分の演算子の交換則は，静止座標系における交換則

に比べて等式の右辺の符号だけが異なっている[1]．このことから，前に交換則から得られた固有値および行列要素に対するすべての結果は，J_ξ, J_η, J_ζ に対してもすべての表式をその複素共役に置きかえなければならない点が異なるだけで，そのまま成り立つ．たとえば J_ζ の固有値は（本節では固有値 $J_z=M$ と区別して記号 k であらわす），整数 $k=-J, \cdots, +J$ となる．ここで J（整数!）はこまの角運動量の値である．

球形こま

回転しているこまのエネルギー固有値を見いだすことは，その三つの主慣性モーメントがすべて等しい場合にもっとも簡単になる：$I_A=I_B=I_C\equiv I$. 分子に対しては，分子が立方体点群の一つの対称性をもつような場合にこれがあてはまる．ハミルトニアン (103.1) は次の形をもつ：

$$\hat{H}=\frac{\hbar^2}{2I}\hat{\boldsymbol{J}}^2.$$

そしてその固有値は

$$E=\frac{\hbar^2}{2I}J(J+1) \tag{103.4}$$

である．これらのエネルギー準位の一つ一つは，こま自身に対する角運動量の $(2J+1)$ 個の方向に関して（すなわち $J_\zeta=k$ の値に関して）[2]縮退している．

対称こま

こまの慣性モーメントのうちの二つのみが等しい場合にも，エネルギー準位を計算することは困難でない：$I_A=I_B\neq I_C$. これは 2 次よりも高次の対称軸を一つもつ分子に対してあてはまる．ハミルトニアン (103.1) は次の形をもつ：

$$\hat{H}=\frac{\hbar^2}{2I_A}(\hat{J}_\xi^2+\hat{J}_\eta^2)+\frac{\hbar^2}{2I_C}\hat{J}_\zeta^2=\frac{\hbar^2}{2I_A}\hat{\boldsymbol{J}}^2+\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{I_C}-\frac{1}{I_A}\right)\hat{J}_\zeta^2. \tag{103.5}$$

これからわかるように，確定値 J および k をもつ状態においてエネルギーは

$$E=\frac{\hbar^2}{2I_A}J(J+1)+\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{I_C}-\frac{1}{I_A}\right)k^2 \tag{103.6}$$

---

1) このことは次のことを示している．こまの波動関数に対する作用の点で言えば，xyz 系の回転は $\xi\eta\zeta$ 系の逆回転と等価である．

2) ここおよび以下において，われわれは，静止座標系に関する角運動量の方向についての $(2J+1)$-重の縮退を無視することにする．この縮退はいつも起こるが，物理的には重要でない．それを考慮すると，球形こまのエネルギー準位の全縮退度は $(2J+1)^2$ である．

となる．これにより，対称こまのエネルギー準位が決定される．

球形こまに対して起こる k の値に関する縮退は，ここでは部分的に解かれる．エネルギーの値は，符号だけが異なる k の値に対してのみ同じとなる．これらは，こまの軸に関して互いに反対の方向を向いた角運動量に対応している．したがって，$k \neq 0$ に対する対称こまのエネルギー準位は2種に縮退している．

したがって対称こまの定常状態は三つの量子数によって特徴づけられる：角運動量 J およびこまの軸へのその投影 ($J_\zeta = k$) および空間に固定された軸 z へのその投影 ($J_z = M$)．このうちの最後の値にはこまのエネルギーは依存しない．これらに関して次のことに注意する必要がある．角運動量の値および空間に固定された軸へのその投影および物体と固く結ばれた軸[1]へのその投影が同時に測定可能であることは，演算子 $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ および $\hat{J}_z$ が互いに可換であるばかりでなく，それらが演算子 $\hat{J}_\zeta = \hat{\boldsymbol{J}}\boldsymbol{n}$ とも可換であることによるものである（$\boldsymbol{n}$ は軸 ζ に沿った単位ベクトルである）．このような状況は直接の計算によって容易に確かめることもできるが，またアプリオリにも明らかである．すなわち，角運動量演算子は無限小回転の演算子に帰着されるが，こまに結びつけられた二つのベクトルのスカラー積 $\boldsymbol{Jn}$ は座標系の任意の回転に対して不変である．

対称こまの定常状態の波動関数を求める課題は，結局演算子 $\hat{\boldsymbol{J}}^2$, $\hat{J}_z$, $\hat{J}_\zeta$ の共通な固有関数を見出すことに帰着される．言いかえると，この問題は有限回転における角運動量の固有関数の変換則と密接に関連している．量子数の記号を変えて，この変換則 (58.7) を次の形に書こう：

$$\psi_{JM} = \sum_k D^{(J)}_{kM}(\alpha, \beta, \gamma)\psi_{Jk}. \qquad (103.7)$$

ここで ψ_{JM} は静止した座標軸 x, y, z に関して記述されたこまの状態の波動関数であり，ψ_{Jk} はこまに結びつけられた軸 $\xi\eta\zeta$ に関して記述された状態の波動関数であるとしよう．しかしながら物体（こま）に固く結びついた座標では，ψ_{Jk} の値は空間中の物体の方向に依存しない確定値を持つ．それを $\psi^{(0)}_{Jk}$ と呼ぼう．式 (103.7) は関数 ψ_{JM} の角依存性を与える．今状態 $|JM\rangle$ は軸 ζ への角運動量の投影の確定値 k をも与えるとしよう．このことは，あらゆる値のうち

1) 空間に固定された二つの軸への投影（これは同時に測定可能でない）と混同しないこと．

で，与えられた値 k をもつときにのみ $\psi^{(0)}_{Jk}$ がゼロでなくなるということを意味する．このとき (103.7) の和は一つの項に帰着されて次式を得る：

$$\psi_{JMk}=\psi^{(0)}_{Jk}D^{(J)}_{kM}(\alpha, \beta, \gamma).$$

この式によって，静止した軸に関するこまの軸の回転を決定するオイラー角への状態 $|JMk\rangle$ の波動関数の依存性が得られる．条件

$$\int|\psi_{JMk}|^2 \sin\beta d\alpha d\beta d\gamma=1$$

によって波動関数を規格化すると

$$\psi_{JMk}=i^J\sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}}D^{(J)}_{kM}(\alpha, \beta, \gamma) \qquad (103.8)$$

を得る．位相因子は，$k=0$ で関数 (103.8) が投影 M をもつ自由な（つまり軸 ζ にはけっして結びついていない）整数の角運動量 J の固有関数，すなわちふつうの（球）関数（(58.25) 参照[1]）に移行するように選んだ．

非対称こま

$I_A\neq I_B\neq I_C$ に対してエネルギー準位を一般的な形に計算することは不可能である．こまに関する角運動量の方向についての縮退はここでは完全に解かれて，与えられた J に対しては $2J+1$ 個の異なる非縮退準位が対応する．（与えられた J に対する）これらの準位の計算は行列の形に書かれたシュレーディンガー方程式からはじめられる (O. Klein, 1929)．それは次のようにしてなされる．

角運動量 J および ζ 成分の確定値を持つこまの状態の波動関数 ψ_{Jk} はすでに上で求められた関数 (103.8) である（角運動量の z 成分 M の添字は簡単のため以下に省略した．エネルギーはこの値に依存しない)．この状態においては，非対称こまのエネルギーは確定値をもたない．逆に定常状態において角運動量の成分 J_ζ は確定値をもたない．つまりエネルギー準位に対して確定値 k が定められない．これらの状態の波動関数は線形結合の形に書かれて

$$\psi_J=\sum_k c_k\psi_{Jk} \qquad (103.9)$$

---

1) 有限回転の理論を用いないで式 (103.8) を直接に導く方法が本節の問題1に示してある．波動関数 (103.8) に関するいろいろな量の行列要素の計算は § 110, § 87 を参照せよ（対応する式は二原子分子（スピン・ゼロ）に対する式と量子数の記号が異なるだけである．§ 82 の 2 番目の脚注参照).

となる（これらの関数はすべて，何らかの同一の値 M を持つことが想定されている）．シュレーディンガーの方程式 $\hat{H}\psi_J=E_J\psi_J$ に代入すると方程式の組

$$\sum_{k'}(\langle Jk|H|Jk'\rangle-E\delta_{kk'})c_{k'}=0 \tag{103.10}$$

が得られ，この方程式の組が解を持つための条件より，永年方程式

$$|\langle Jk|H|Jk'\rangle-E\delta_{kk'}|=0 \tag{103.11}$$

が得られる．この方程式の解はこまのエネルギー準位を決定し，そのあとで方程式の組（103.10）はハミルトニアンを対角化する線形結合（103.9），すなわち与えられた値 J（および M）をもつこまの定常状態の波動関数を与える．これらの波動関数に関する任意の物理量の行列要素を計算することは，このようにして対称こまの行列要素の計算に帰着する．

演算子 $\hat{J}_\xi$, $\hat{J}_\eta$ は k が 1 だけ変わる遷移に対してのみ行列要素をもつが，$\hat{J}_\zeta$ は対角要素のみをもつ（式（27.13）参照．その式で L, M のかわりに J, k と書く）．したがって，演算子 $\hat{J}_\xi^2, \hat{J}_\eta^2, \hat{J}_\zeta^2$ およびそれらに伴って $\hat{H}$ は，$k\to k$，$k\pm2$ をもつ遷移に対してのみ行列要素をもつ．偶数および奇数の k をもつ状態間の遷移に対する行列要素が存在しないために，$2J+1$ 階の永年方程式はただちに J 階および $J+1$ 階の二つの独立な方程式に分解されることになる．それらのうちの一つは偶数の k をもつ状態間の遷移に対する行列要素からなり，他は奇数の k をもつ状態間の遷移に対する行列要素からなる．

これらの各方程式はそれ自身，より低階の二つの方程式に還元される．そのためには，関数 ψ_{Jk} に基づいてではなく，関数

$$\begin{aligned}\psi_{Jk}^{+}&=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{Jk}+\psi_{J,-k})\\ \psi_{Jk}^{-}&=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{Jk}-\psi_{J,-k})\quad(k\neq0)\\ \psi_{J0}^{+}&=\psi_{J0}\end{aligned} \tag{103.12}$$

に基づいて決定される行列要素を用いなければならない．添字 ＋ および － が異なる関数は（ζ 軸を含む平面での鏡映に関して）異なる対称性をもち（この鏡映は k の符号を変える），したがってそれらの間の遷移に対する行列要素はゼロとなる．このようなわけで，＋ 状態および － 状態に対して別々に永年方程式をつくることができる．

ハミルトニアン (103.1) および交換則 (103.3) は特別の対称性をもつ．両者は演算子 $\hat{J}_\xi, \hat{J}_\eta, \hat{J}_\zeta$ のうちの任意の二つの符号を同時に変えることに関して不変である．この対称性は形式的に群 $\boldsymbol{D}_2$ に対応するので，非対称こまの準位は，この群の既約表現に基づいて分類できる．したがって，表現 A, B_1, B_2, B_3 に対応する四つの型の非縮退準位がある (458 頁，第 7 表参照)．

非対称こまのどの状態がこれらの型のおのおのに属するかを調べることは容易である．そのためには関数 ψ_{Jk} およびそれらから導かれる関数 (103.12) の対称性を明らかにしなければならない．それは式 (103.8) を基にして直接なされることができる．しかしながらより一般的な球関数から始めるのがより簡単である．すなわちそれらの対称性に関して，軸 ζ への角運動量の投影の確定値をもつ状態の波動関数は，次の角運動量の固有関数と同じであることに注目する：

$$\psi_{Jk} \sim Y^*_{Jk}(\theta, \varphi) \sim e^{-ik\varphi}\Theta_{Jk}(\theta). \tag{103.13}$$

ここで θ, φ は $\xi\eta\zeta$-軸における球面角である．そして記号 ～ は《同じように変換される》ことを意味する．(103.13) で複素共役がとられるわけは，交換関係 (103.3) の右辺で符号が変わるためである．

ζ 軸の回りの角度 π だけの回転 (つまり対称操作 $C_2^{(\zeta)}$) は，(103.13) の関数に $(-1)^k$ を掛ける：

$$C_2^{(\zeta)} : \psi_{Jk} \longrightarrow (-1)^k \psi_{Jk}.$$

操作 $C_2^{(\eta)}$ は，反転と $\xi\zeta$-面での鏡映を逐次行なう結果とみなすことができる；最初の操作は ψ_{Jk} に $(-1)^J$ を乗じ，第 2 の操作 (φ の符号を変える) は k の符号を変えることと同等である．関数 $\Theta_{J,-k}$ の定義 (28.6) を考慮すると，次式を得る：

$$C_2^{(\eta)} : \psi_{Jk} \longrightarrow (-1)^{J+k} \psi_{J,-k}.$$

最後に，変換 $C_2^{(\xi)} = C_2^{(\eta)} C_2^{(\zeta)}$ に対して

$$C_2^{(\xi)} : \psi_{Jk} \longrightarrow (-1)^J \psi_{J,-k}$$

を得る．

これらの変換則を考慮すると，関数 (103.12) に対応する状態は次の型の対称性に属することがわかる：

$$
\psi_{Jk}^{+}\begin{cases}\text{偶数の}\ J,\ \text{偶数の}\ k & A\\ \text{偶数の}\ J,\ \text{奇数の}\ k & B_3\\ \text{奇数の}\ J,\ \text{偶数の}\ k & B_1\\ \text{奇数の}\ J,\ \text{奇数の}\ k & B_2\end{cases}
\qquad
\psi_{Jk}^{-}\begin{cases}\text{偶数の}\ J,\ \text{偶数の}\ k & B_1\\ \text{偶数の}\ J,\ \text{奇数の}\ k & B_2\\ \text{奇数の}\ J,\ \text{偶数の}\ k & A\\ \text{奇数の}\ J,\ \text{奇数の}\ k & B_3\end{cases}
\tag{103.14}
$$

J の与えられた値に対するおのおのの型の状態数は，単純に数えることにより容易に見いだすことができる．すなわち型 A および型 B_1, B_2, B_3 のおのおのに対して次の状態数が対応する．

	A	B_1, B_2, B_3
偶数の J	$\dfrac{J}{2}+1$	$\dfrac{J}{2}$
奇数の J	$\dfrac{J-1}{2}$	$\dfrac{J+1}{2}$

(103.15)

非対称こまに対しては，型 A, B_1, B_2, B_3 の状態間の遷移に関する行列要素に対して選択規則がある．この選択規則は，対称性の考察によりふつうの方法で容易に得ることができる．したがって，ベクトル物理量 $\boldsymbol{A}$ の成分に対して次の選択規則を得る：

$$
\begin{aligned}
&A_\xi\ \text{に対して：}\quad A\leftrightarrow B_3^{(\xi)},\quad B_1^{(\zeta)}\leftrightarrow B_2^{(\eta)},\\
&A_\eta\ \text{に対して：}\quad A\leftrightarrow B_2^{(\eta)},\quad B_1^{(\zeta)}\leftrightarrow B_3^{(\xi)},\\
&A_\zeta\ \text{に対して：}\quad A\leftrightarrow B_1^{(\zeta)},\quad B_2^{(\eta)}\leftrightarrow B_3^{(\xi)}.
\end{aligned}
\tag{103.16}
$$

(明らかにするため，表現に対する記号の添字として，考えている表現において指標 $+1$ をもつ回転が行なわれる軸を示した).

問　　題

1.　演算子 $\hat{\boldsymbol{J}}^2$, $\hat{J}_z$, $\hat{J}_\zeta$ の固有関数を直接計算することにより，対称こまの状態 $|JMk\rangle$ の波動関数を求めよ (F. Reiche, H. Rademacher, 1926).

解　オイラー角 α, β, γ の関数として ψ_{JMk} を求めるためには，静止した軸 xyz への角運動量の投影演算子をそれらの角を用いてあらわさなければならない．ある軸への角運動量の投影演算子は $-i\partial/\partial\varphi$ であるから（これで φ はその軸のまわりの回転角である),

$$\hat{J}_x=-i\frac{\partial}{\partial\varphi_x},\qquad \hat{J}_y=-i\frac{\partial}{\partial\varphi_y},\qquad \hat{J}_z=-i\frac{\partial}{\partial\varphi_z}$$

と書くことができる．ここで φ_x, φ_y, φ_z は対応する軸のまわりの回転角である．これらの角に関する微分は，無限小回転が（回転軸の方向を向いた）ベクトルのように合成されることに気づけば，α, β, γ に関する微分であらわすことができる．オイラー角であらわした無限小回転のベクトル $\delta\alpha$, $\delta\beta$, $\delta\gamma$ の方向が第20図（§ 58）に示してある．それらを静止した軸 xyz へ投影すると，これらの軸のまわりの回転角を次の形に求めることができる：

$$\begin{aligned}
\delta\varphi_x&=-\sin\alpha\,\delta\beta+\cos\alpha\sin\beta\,\delta\gamma,\\
\delta\varphi_y&=\cos\alpha\,\delta\beta+\sin\alpha\sin\beta\,\delta\gamma,\\
\delta\varphi_z&=\delta\alpha+\cos\beta\,\delta\gamma.
\end{aligned}$$

これを逆に解いて

$$\begin{aligned}
\delta\alpha&=-\cot\beta\cos\alpha\,\delta\varphi_x-\cot\beta\sin\alpha\,\delta\varphi_y+\delta\varphi_z,\\
\delta\beta&=-\sin\alpha\,\delta\varphi_x+\cos\alpha\,\delta\varphi_y,\\
\delta\gamma&=\frac{\cos\alpha}{\sin\beta}\delta\varphi_x+\frac{\sin\alpha}{\sin\beta}\delta\varphi_y
\end{aligned}$$

を得る．これらの式をもとにして

$$\begin{aligned}
\hat{J}_x&=-i\left(-\cos\alpha\cot\beta\frac{\partial}{\partial\alpha}-\sin\alpha\frac{\partial}{\partial\beta}+\frac{\cos\alpha}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\gamma}\right),\\
\hat{J}_y&=-i\left(-\sin\alpha\cot\beta\frac{\partial}{\partial\alpha}+\cos\alpha\frac{\partial}{\partial\beta}+\frac{\sin\alpha}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\gamma}\right),\\
\hat{J}_z&=-i\frac{\partial}{\partial\alpha}
\end{aligned}$$

が得られる．関数 ψ_{JMk} に作用させると，演算子 $\hat{J}_z=-i\partial/\partial\alpha$ および $\hat{J}_\zeta=-i\partial/\partial\gamma$（$\gamma$ は軸 ζ のまわりの回転角である）はそれぞれ M および k に置き換えられる（それに相応する α および γ への波動関数の依存性は因子 $\exp(i\alpha M+i\gamma k)$ で与えられる）．それゆえ

$$\begin{aligned}
\hat{J}_+=\hat{J}_x+i\hat{J}_y&=e^{i\alpha}\left(\frac{\partial}{\partial\beta}-M\cot\beta+\frac{k}{\sin\beta}\right),\\
\hat{J}_-=\hat{J}_x-i\hat{J}_y&=e^{-i\alpha}\left(-\frac{\partial}{\partial\beta}-M\cot\beta+\frac{k}{\sin\beta}\right)
\end{aligned}$$

となる．これ以後の導出は § 28 の終りに示した導出とまったく同じである．$M=J$ をもつ波動関数に対して成り立つ等式 $\hat{J}_+\psi_{JJk}=0$ から出発する．これから方程式

$$\left(\frac{\partial}{\partial\beta}-J\cot\beta+\frac{k}{\sin\beta}\right)\psi_{JJk}=0$$

が成り立つ．この方程式の規格化された解は

$$\psi_{JJk}=i^J(-1)^{J-k}\left[\frac{(2J+1)!}{2(J+k)!(J-k)!}\right]^{1/2}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{J+k}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{J-k}\frac{e^{i(J\alpha+k\gamma)}}{2\pi}$$

である（規格化積分はオイラーのベータ積分に帰着される）．この式は位相因子を別として，関数（(58.26) 参照）

$$\sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}}D_{kJ}^{(J)}(\alpha,\beta,\gamma)$$

と実際に一致する．位相因子は（103.7）の定義と一致するように選んである．

$M<J$をもつ波動関数は，この後で次の式をψ_{JJk}にくり返して適用することにより計算される：

$$\hat{J}_-\psi_{J,M+1,k}=\sqrt{(J-M)(J+M+1)}\,\psi_{JMk}.$$

最終的な結果は（103.8）に一致する．ここで関数$D_{kM}^{(J)}$は式（58.10），（58.11）によって与えられる（そして同時にこれらの関数の対称性（58.18）を考慮しなければならない）．

2. 非対称こまに対する行列要素$\langle Jk'|H|Jk\rangle$を計算せよ．

解　公式（27.13）を用いて次式を得る：

$$\langle k|J_\xi^2|k\rangle=\langle k|J_\eta^2|k\rangle=\frac{1}{2}[J(J+1)-k^2],$$

$$\langle k|J_\xi^2|k+2\rangle=\langle k+2|J_\xi^2|k\rangle=-\langle k|J_\eta^2|k+2\rangle=-\langle k+2|J_\eta^2|k\rangle$$

$$=\frac{1}{4}\sqrt{(J-k)(J-k-1)(J+k+1)(J+k+2)}$$

（簡単のため，行列要素の対角添字J, Jはすべて省略する）．これから求めているHの行列要素に対して次式を得る[1)]：

$$\langle k|H|k\rangle=\frac{\hbar^2}{4}(a+b)[J(J+1)-k^2]+\frac{\hbar^2}{2}ck^2,$$

$$\langle k|H|k+2\rangle=\langle k+2|H|k\rangle \qquad (1)$$

$$=\frac{\hbar^2}{8}(a-b)\sqrt{(J-k)(J-k-1)(J+k+1)(J+k+2)}.$$

関数（103.12）に関する行列要素は，式（1）における行列要素を用いて次の関係式であらわされる：

$$\langle k\pm|H|k\pm\rangle=\langle k|H|k\rangle, \quad k\neq 1,$$

$$\langle 1\pm|H|1\pm\rangle=\langle 1|H|1\rangle\pm\langle 1|H|-1\rangle, \qquad (2)$$

$$\langle k\pm|H|k+2,\pm\rangle=\langle k|H|k+2\rangle, \quad k\neq 0,$$

$$\langle 0+|H|2+\rangle=\sqrt{2}\langle 0|H|2\rangle.$$

3. $J=1$に対する非対称こまのエネルギー準位を決定せよ．

解　3次の永年方程式は三つの1次方程式に分解される．それらのうちの一つは

$$E_1=\langle 0+|H|0+\rangle=\frac{\hbar^2}{2}(a+b) \qquad (3)$$

である．これから他の二つのエネルギー準位をただちに書くことができる．そのわけは，あらかじめわかるように，三つのパラメーターa, b, cは問題の中に対称の形で入っているからである．したがって

1）問題2～5においては簡単のために記号

$$a=1/I_A, \quad b=1/I_B, \quad c=1/I_C$$

を用いて式を書いた．

$$E_2=\frac{\hbar^2}{2}(a+c), \qquad E_3=\frac{\hbar^2}{2}(b+c). \tag{4}$$

準位 E_1, E_2, E_3 はそれぞれ対称の型 B_1, B_2, B_3 に属する[1]．これらの状態の波動関数は

$$\psi_1=\psi_{10}^+, \qquad \psi_2=\psi_{11}^+, \qquad \psi_3=\psi_{11}^-$$

である．

4. $J=2$ に対して前問と同様の計算を行なえ．

解　5次の永年方程式は，三つの1次方程式と一つの2次方程式に分解される．1次方程式の一つは次の形をもつ：

$$E_1=\langle 2-|H|2-\rangle=2\hbar^2c+\frac{\hbar^2}{2}(a+b) \tag{5}$$

(B_1 型準位)．これからただちに結論されるように，他の二つの準位 (B_2 および B_3 型) は次のものである：

$$E_2=2\hbar^2b+\frac{\hbar^2}{2}(a+c), \qquad E_3=2\hbar^2a+\frac{\hbar^2}{2}(b+c).$$

これらの三つの準位には次の波動関数が対応する：

$$\psi_1=\psi_{22}^-, \qquad \psi_2=\psi_{21}^-, \qquad \psi_3=\psi_{21}^+.$$

2次方程式は次の形をもつ：

$$\begin{vmatrix} \langle 0+|H|0+\rangle-E & \langle 2+|H|0+\rangle \\ \langle 2+|H|0+\rangle & \langle 2+|H|2+\rangle-E \end{vmatrix}=0. \tag{6}$$

これを解いて次式を得る：

$$E_{4,5}=\hbar^2(a+b+c)\pm\hbar^2[(a+b+c)^2-3(ab+bc+ac)]^{1/2} \tag{7}$$

これらの準位は A 型に属する．これらに対応する波動関数は関数 ψ_{20}^+ および ψ_{22}^+ の線形結合である．

5. $J=3$ に対して前問と同様の計算を行なえ．

解　7次の永年方程式は，一つの1次方程式および三つの2次方程式に分解される．1次方程式は次の形をもつ：

$$E_1=\langle 2-|H|2-\rangle=2\hbar^2(a+b+c) \tag{8}$$

(A 型準位)．2次方程式の一つは前問の方程式 (6) である (異なる J の値をもつ)．その根は：

$$E_{2,3}=\frac{5\hbar^2}{2}(a+b)+\hbar^2c\pm\hbar^2[4(a-b)^2+c^2+ab-ac-bc]^{1/2} \tag{9}$$

(B_1 型準位)．残りの準位はこれからパラメーター a, b, c の置換によって得られる．

6. 任意の外電場の中にある4重極モーメントをもつ系の準位の分裂を決定せよ．

解　座標軸としてテンソル $\partial^2\varphi/\partial x_i\partial x_k$ の主軸をとれば (§76，問題3参照)，系のハ

1) このことは対称性の考察からただちに導かれる．たとえば，エネルギー E_1 はパラメーター a および b に関して対称である；ξ および η 軸に関する対称性が等しい状態 (B_1 型の状態) のエネルギーもまた a および b に関して対称でなければならない．

ミルトニアンの4重極モーメントを含む部分は次の形に書ける：

$$\hat{H}=A\hat{J}_x^2+B\hat{J}_y^2+C\hat{J}_z^2,\qquad A+B+C=0.$$

この式はハミルトニアン（103.1）と完全な形式的類似をもつため，本問題は非対称こまのエネルギー準位を見いだす問題と等価である．その場合，異なっている点は，ここでは係数の和が $A+B+C=0$ であることと角運動量が半整数値をとることができることである．この後者の性質のため計算は同じ方法で新しく行なわなければならないが，整数の J に対しては問題3-5の結果を用いることができる．その結果 J の最初のいくつかの値に対して，エネルギー変化 ΔE の次のような値を得る：

$$J=1:\Delta E=-A,\ -B,\ -C,$$

$$J=\frac{3}{2}:\Delta E=\pm\sqrt{\frac{3}{2}(A^2+B^2+C^2)},$$

$$J=2:\Delta E=3A,\ 3B,\ 3C,\ \pm\sqrt{6(A^2+B^2+C^2)}.$$

$J=3/2$ に対してエネルギー準位は2重縮退のままであるが，これはクラマースの定理と一致する（§60）．

§ 104.　分子の振動と回転の相互作用

これまで回転および振動を分子の独立な運動とみなしてきた．ところが実際には，両者が同時に存在すると，それらの間の独特の相互作用が生ずる（E. Teller, L. Tisza, G. Placzek, 1932–1933）．

直線形多原子分子の考察から始めよう．直線形分子は二つの型の振動を行なうことができる（§100の終り参照）：一つの振動数をもつ縦振動と2重の振動数をもつ横振動とである．いまわれわれに興味があるのは後者である．

横振動を行なっている分子は，一般的にいってある角運動量をもつ．このことは簡単な力学的考察からも明らかであるが[1]，量子力学的考察によっても示すことができる．後者はまた与えられた振動状態におけるこの角運動量の可能な値を決定することもできる．

分子においてある一つの2重振動数 ω_α が励起されていると仮定する．振動量子数 v_α をもつエネルギー準位は，$(v_\alpha+1)$-重に縮退している．この準位に対して，$v_\alpha+1$ 個の波動関数

$$\psi_{v_{\alpha1}v_{\alpha2}}=\text{const}\cdot\exp\left[-\frac{1}{2}c_\alpha^2(Q_{\alpha1}^2+Q_{\alpha2}^2)\right]H_{v_{\alpha1}}(c_\alpha Q_{\alpha1})H_{v_{\alpha2}}(c_\alpha Q_{\alpha2})$$

1）たとえば，位相差 $\pi/2$ をもつ互いに垂直方向を向いた二つの横振動は，縦軸の回りの曲がった分子の純粋回転とみなすことができる．

(ここで $v_{\alpha 1}+v_{\alpha 2}=v_\alpha$)，またはそれらのある任意の独立の線形結合が対応する．指数因子に掛けられる ($Q_{\alpha 1}$ および $Q_{\alpha 2}$ に関する) 多項式の最高次数は，これらの関数すべてにおいて同じであり，それは v_α 次である．明らかに，関数 $\psi_{v_{\alpha 1} v_{\alpha 2}}$ の次の形をした線形結合を基底関数に選ぶことがいつもできる：

$$\psi_{v_\alpha l_\alpha}=\mathrm{const}\cdot\exp\left[-\frac{1}{2}c_\alpha^2(Q_{\alpha 1}^2+Q_{\alpha 2}^2)\right]$$
$$\times\left[(Q_{\alpha 1}+iQ_{\alpha 2})^{(v_\alpha+l_\alpha)/2}(Q_{\alpha 1}-iQ_{\alpha 2})^{(v_\alpha-l_\alpha)/2}+\cdots\right]. \quad (104.1)$$

角括弧の中は定められた多項式をあらわし，その中で最高次の項のみを書きあらわした．l_α は $v_\alpha+1$ 個の異なる値をとることのできる整数である：$l_\alpha=v_\alpha$, $v_\alpha-2$, $v_\alpha-4, \cdots, -v_\alpha$.

横振動の基準座標 $Q_{\alpha 1}, Q_{\alpha 2}$ は，分子軸からの二つの互いに垂直な変位である．この軸の回りの角度 φ だけの回転に対して，多項式の最高次の項 (およびそれに伴ってすべての関数 $\psi_{v_\alpha l_\alpha}$) は

$$\exp\left\{i\varphi\left(\frac{v_\alpha+l_\alpha}{2}\right)-i\varphi\left(\frac{v_\alpha-l_\alpha}{2}\right)\right\}=\exp(il_\alpha\varphi)$$

が掛けられる．これから明らかなように，関数 (104.1) は軸の回りの角運動量 l_α をもつ状態に対応する．

このようなわけでわれわれは次の結果に到達する．すなわち，(量子数 v_α をもち) 2重振動数 ω_α が励起している状態において，分子は値

$$l_\alpha=v_\alpha, \quad v_\alpha-2, \quad v_\alpha-4, \quad \cdots, \quad -v_\alpha \quad (104.2)$$

をとる(分子軸のまわりの) 角運動量をもつ．これは分子の**振動角運動量**と呼ばれる．もしもいくつかの横振動が同時に励起していると，全振動角運動量は和 $\sum_\alpha l_\alpha$ である．電子の軌道角運動量とともに合成されると，それは分子軸のまわりの分子の全角運動量 l を与える．

分子の全角運動量 J は (2原子分子におけると同じく)，軸のまわりの角運動量より小さくなることはない．すなわち J は値

$$J=|l|, \quad |l|+1, \quad \cdots$$

をとる．いいかえると，$J=0, 1, \cdots, |l|-1$ をもつ状態は存在しない．

調和振動に対してエネルギーは数 v_α のみに依存し，l_α には依存しない．(l_α の値に関する) 振動準位の縮退は非調和振動の存在によって解かれる．しかし

縮退は完全には解かれない：準位は２重縮退のままで，すべての l_α と l の符号を同時に変えることで区別される二つの状態は同じエネルギーをもつ；（調和振動の後の）次の近似において

$$\sum_{\alpha,\beta} g_{\alpha\beta} l_\alpha l_\beta$$

（$g_{\alpha\beta}$ は定数）の形をした角運動量 l_α に関して２次の項がエネルギーにあらわれる．このまだ残っている２重縮退は，２原子分子における Λ-2 重項に似た効果によって解かれる．

非直線形分子に戻ると，まず最初に純粋に力学的性質をもつつぎの注意をする必要がある．任意の（非線形）粒子系に対しては，一般にどのようにして振動運動を回転運動から分離することができるかという問題が発生する．いいかえると，《非回転系》ということにより何を意味するかという問題である．一見したところでは，回転が存在しないためには，角運動量が恒等的にゼロとなればよいと思われるかもしれない：

$$\sum m[\boldsymbol{rv}]=0 \tag{104.3}$$

（この和は系の粒子に対してとられる）．しかしながら左辺の式は，座標のいかなる関数の時間に関する完全微分ではない．したがって，上の式は時間に関して積分されず，座標のある関数がゼロに等しいという形に定式化されることができない．ところがこのことは，《純粋な振動》および《純粋な回転》という概念を合理的に定式化することができるためには必要なことである．

したがって回転が存在しないことの定義として，条件

$$\sum m[\boldsymbol{r}_0\boldsymbol{v}]=0 \tag{104.4}$$

をとらなければならない．ここで $\boldsymbol{r}_0$ は粒子の平衡位置の動径ベクトルである．$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_0+\boldsymbol{u}$ と書くと（ここで $\boldsymbol{u}$ は微小振動における変位），$\boldsymbol{v}=\dot{\boldsymbol{r}}=\dot{\boldsymbol{u}}$ を得る．方程式（104.4）は時間に関して積分されて，その結果次式を得る：

$$\sum m[\boldsymbol{r}_0\boldsymbol{u}]=0. \tag{104.5}$$

分子の運動は，条件（104.5）を満足する純粋な振動運動および分子全体としての回転との結合とみなすことができる[1]．

角運動量を次の形

1）並進運動は，分子の重心が静止している座標系を選ぶことにより，最初から取り除かれていると考えられる．

$$\sum m[\boldsymbol{rv}]=\sum m[\boldsymbol{r}_0\boldsymbol{v}]+\sum m[\boldsymbol{uv}]$$

に書くと，回転が存在しないための定義式 (104.4) により，振動角運動量は和 $\sum m[\boldsymbol{uv}]$ であると考えなければならないことがわかる．しかしながら，この角運動量は系の全角運動量の部分にすぎず，それ自身では保存されないことを考慮しなければならない．したがって，各振動状態に対しては振動角運動量の平均値のみを定めることができる．

2回以上の対称軸を一つももたない分子は非対称こまの型に属する．この型の分子では，すべての振動数は1重である（それらの対称性の群は1次元の既約表現のみをもっている）．したがって，あらゆる振動準位は縮退していない．しかしながら，あらゆる非縮退状態において，角運動量の平均はゼロとなる(§26参照)．それゆえ，非対称こまの型の分子では，振動角運動量の平均はあらゆる状態でゼロとなる．

もしも分子の対称要素のうちで，2回以上の軸が一つ存在すると，分子は対称こまの型に属する．このような分子は1重振動数と2重振動数の振動をもつ．前者の振動角運動量の平均はふたたびゼロとなる．ところが2重振動数に対しては，分子軸への角運動量の投影の平均値はゼロでない．

(対称こまの型の)分子の回転運動エネルギーに対する式は，回転角運動量を考慮すると容易に求められる．このエネルギー演算子が (103.5) と異なる点は，こまの回転角運動量のかわりに，分子の（保存される）全角運動量 $\boldsymbol{J}$ とそれの振動角運動量 $\boldsymbol{J}^{(v)}$ との差に置きかえる点だけである：

$$\hat{H}_{\text{rot}}=\frac{\hbar^2}{2I_A}(\hat{\boldsymbol{J}}-\hat{\boldsymbol{J}}^{(v)})^2+\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{I_C}-\frac{1}{I_A}\right)(\hat{J}_\zeta-\hat{J}_\zeta^{(v)})^2. \quad (104.6)$$

求めているエネルギーは平均値 $\overline{H}_{\text{rot}}$ である．(104.6) の中の $\boldsymbol{J}$ の成分の自乗を含む項は，(103.6) と同じく純粋な回転エネルギーを与える．$\boldsymbol{J}^{(v)}$ の成分の自乗を含む項は，回転量子数に依存しない定数を与える；それは無視できる．ところが $\boldsymbol{J}$ および $\boldsymbol{J}^{(v)}$ の成分の積を含む項は，ここでわれわれに興味のある分子の振動と回転との相互作用の効果をあらわしている；これは**コリオリ相互作用**と呼ばれる（これは古典力学におけるコリオリの力に対応することを考慮せよ）．この項を平均する場合に，振動角運動量の横成分 (ξ, η) の平均値がゼロであることを考慮しなければならない．したがって，コリオリ相互作用エネル

ギーに対して次式を得る：

$$E_{\text{cori}} = -\frac{\hbar^2}{I_C} k k_v. \tag{104.7}$$

ここで k（整数）は，§103 におけると同様，分子軸への全角運動量の投影であり，$k_v=\overline{J_\zeta^{(v)}}$ は与えられた振動状態を特徴づける振動角運動量の投影の平均値である；k_v は k と違って，けっして整数ではない．

最後に，球状こまの型の分子を考察しよう．これには立方体群のどれかの対称性をもつ分子が属する．このような分子は1重，2重，および3重振動数をもつ（それに対応して，立方体群の既約表現の1, 2 および3次元表現がある）．振動準位の縮退はいつものように非調和振動によって部分的に解かれる；これらの効果を考慮した後に残るものは，非縮退準位の他に2重および3重縮退準位だけである．われわれは，ここで準位の非調和性によって分裂するこれらの準位について論じよう．

球状こまの型の分子では，振動角運動量の平均は非縮退振動状態におけるのみならず，2重縮退振動状態においてもゼロとなることは容易にわかる．このことは，対称の性質に基づいた簡単な考察からも導かれる．実際に，一つのエネルギー縮退準位に属する二つの状態における平均角運動量のベクトルは，分子のあらゆる対称変換によって互いに変換されなければならない．しかしながら，立方体対称群のうちのどれ一つをとっても，互いにそれらの間だけで変換される二つの方向の存在を許すことはない；それらの間だけで互いに変換されるのは，三つ以上の方向の集合についてのみである．

このような考察から，3重に縮退した振動準位に対応する状態においては，振動角運動量はゼロでないことがわかる．振動状態に関する平均を行なうと，この角運動量は演算子であらわされ，その行列要素は三つの互いに縮退した状態間の遷移に対応する．このような状態の数に合わせて，この演算子は $\zeta\hat{\boldsymbol{l}}$ の形をもたなければならない．ここで $\hat{\boldsymbol{l}}$ は角運動量演算子で，1に等しく（それにより $2l+1=3$），ζ は考えている振動準位を特徴づける定数である．分子の回転運動のハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2I}(\hat{\boldsymbol{J}} - \hat{\boldsymbol{J}}^{(v)})^2$$

であり，平均をとると次の演算子となる：

$$\hat{H}_{\mathrm{rot}}=\frac{\hbar^2}{2I}\hat{\boldsymbol{J}}^2+\frac{\hbar^2}{2I}\overline{\hat{\boldsymbol{J}}^{(v)2}}-\frac{\hbar^2}{I}\zeta\hat{\boldsymbol{J}}\hat{\boldsymbol{l}}. \tag{104.8}$$

第1項の固有値はふつうの回転エネルギー (103.4) であり，第2項は回転量子数に依存しない定数を与える．これに対して，(104.8) の最後の項は求めている振動準位のコリオリ分裂エネルギーを与える．量 $\boldsymbol{Jl}$ の固有値はふつうの方法で計算される；（与えられた $\boldsymbol{J}$ に対して）それは三つの異なる値をとる（それらはベクトル $\boldsymbol{l}+\boldsymbol{J}$ の値 $J+1$, $J-1$, J に対応する）．その結果次式を得る：

$$E_{\mathrm{cori}}^{(J+1)}=-\frac{\hbar^2}{I}\zeta J,\quad E_{\mathrm{cori}}^{(J-1)}=\frac{\hbar^2}{I}\zeta(J+1),\quad E_{\mathrm{cori}}^{(J)}=\frac{\hbar^2}{I}\zeta. \tag{104.9}$$

§ 105. 分子項の分類

分子の波動関数は，電子の波動関数，核の振動運動の波動関数および回転の波動関数の積であらわされる．これらの関数の対称性の分類および型については，すでに別々に論じた．いまわれわれに残されている問題は，分子項を全体として分類すること，つまり全波動関数の可能な対称性を分類することである．

ある変換に関して三つの因子すべての対称性が与えられれば，その同じ変換に関して積の対称性もまた決定されることは明らかである．状態の対称性を完全に記述するためには，分子中のあらゆる粒子（電子および核）の座標の同時反転に対する全波動関数の振舞いをも指定しなければならない．この変換に対して波動関数がその符号を変えるかまたは不変にとどまるかに従って，状態は**負**または**正**と呼ばれる[1]．

しかしながら，反転に関する状態の特性が意味をもつのは，立体異性体をもたない分子に対してのみであることを考慮しなければならない．立体異性体が存在すると，分子の反転に対してつくられる配位は，空間内のいかなる回転によっても最初の配位に一致させることができないことを意味する（これらの分子はその物質の《右手》および《左手》異性体である）[2]．したがって，立体異

1) ふつうにならって適切とはいえないが，2原子分子に対するのと同じ用語を用いることにする (§86).

2) 立体異性体の存在が可能であるためには，鏡映に関連したいかなる対称要素（反転中心，対称面，回転鏡映軸）をも分子がもたないことが必要である．

性体が存在する場合，反転によって互いに得られる波動関数は，本質的に異なる分子に属するものであって，それを比較することは意味がない[1]．

§86で論じたように，2原子分子において核のスピンは分子項の型に重要な間接的影響を与えている．それは項の縮退の多重度を決定し，ある場合にはある対称性の準位をまったく禁止する．多原子分子についても同じことがいえる．しかしながら，この問題の研究はかなり複雑であり，おのおのの具体的な場合において群論の方法を用いる必要がある．

その方法の考え方は次の点にある．全波動関数は，（いままでわれわれが考察してきた唯一のものである）座標部分の他に，スピン因子をも含まなければならない．それは空間内のある選ばれた方向へのすべての核スピンの投影の関数である．核スピンの投影 σ は $2i+1$ 個の値をとる（i は核スピン）；すべての $\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_N$（$N$ は分子内の原子数）にあらゆる可能な値を与えると，全部で $(2i_1+1)(2i_2+1)\cdots(2i_N+1)$ 個の異なるスピン因子の値が得られる．おのおのの対称変換に対して（同じ種類の）ある核どうしが場所を変える．そして，もしもスピンの値が《その場所にとどまる》と考えるならば，その変換は核の間でのスピンの値の互換と等価である．したがって，異なるスピン因子は互いに変換されて，その結果，分子の対称性の群のある（一般的にいって，可約）表現が得られる．それを既約部分に分解することにより，スピン波動関数の可能な対称の型を見いだすことになる．

スピン因子によって与えられる表現の指標 $\chi_{\mathrm{sp}}(G)$ に対して，一般式を容易に求めることができる．そのためには次のことに注意すれば十分である．すなわち変換に対して変わらないのは，場所を変える核が同じ σ_a をもつようなスピン因子のみである；さもなければ，一つのスピン因子は他のスピン因子に変換されて，指標に寄与しない．σ_a が $2i_a+1$ 個の値をとることを考慮すると，

$$\chi_{\mathrm{sp}}(G)=\prod(2i_a+1) \qquad (105.1)$$

を得る．ここで積は，考えている変換 G に対して互いに位置を変える原子のグループについて（各グループから積の中に1因子ずつの割で）とるものとす

1）厳密にいうと，量子力学は一つの異性体から他の異性体へのゼロでない遷移確率をいつも与える．しかしながら，核が障壁を通り抜ける遷移に関するこの確率は非常に小さく，この現象は無視できる．

る．

しかしながら，座標波動関数の対称性ほどスピン関数の対称性には興味がない（前者で問題にしているのは電子の座標を変えないままでの，核の座標の互換に関する対称性のことである）が，これらの対称性は互いに直接関連している．そのわけは，全波動関数は，核のおのおのの対の互換に対して，ボーズまたはフェルミ統計のどちらに従うかによって，それぞれ符号を変えないか，または符号を変えるかである（いいかえると，$(-1)^{2i}$ を掛けなければならない．ここで i は互換される核のスピンである）．指標（105.1）のなかにそれに対応する因子を導入すると，座標波動関数が変換されるすべての既約表現をその中に含む表現の指標 $\chi(G)$ の系を得る：

$$\chi(G)=\prod(2i_a+1)(-1)^{2i_a(n_a-1)} \tag{105.2}$$

（n_a は，考えている変換に対して互いに位置を変える核の各グループの中の核の数である）．この表現を既約部分に分解すると，分子の座標波動関数の対称性の可能な型および対応するエネルギー準位の縮退度を得る（ここおよび以下では，核の系の異なるスピン状態に関する縮退を意味するものとする）[1]．

状態の対称性のあらゆる型は，分子中の等価な核のグループの全スピンの確定値に関連している（すなわち，分子のいろいろな対称変換に対して互いに位置を変える核のグループについてである）．この関連は1対1でない：状態の対称性のあらゆる型は，一般的にいって，等価な核のグループのスピンのいろいろな値と結びつけられる．この関連をそれぞれの具体的な場合に確立するには，群論の方法を用いてなされる．

非対称こまの型の分子の例として，エチレン分子 $C_2^{12}H_4^1$ を考察しよう（第43図g，対称性の群は $\boldsymbol{D}_{2h}$）．化学記号の上の添字は核がどのアイソトープに属するかを示す；このような添字が必要なわけは，異なるアイソトープの核は異なるスピンをもつからである．この場合，核 H^1 のスピンは1/2であり，核 C^{12} はスピンをもたない．したがって，水素原子のみを考察すればよい．

第43図gに示された座標系を選ぼう（z 軸は分子面に垂直に，x 軸は分子軸に平行にとる）．xy 面での鏡映 $\sigma(xy)$ はすべての原子の位置を変えないが，そ

1）このような意味の準位の縮退度は，しばしば核の統計的重みと呼ばれる（406頁の脚注を参照）．

れ以外の鏡映および回転は一対の水素原子の位置を変える．式 (105.2) によって，次のような表現の指標を得る：

E	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$	I	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$
16	16	4	4	4	4	4	4

この表現を既約部分に分解すると，その中には群 $\boldsymbol{D}_{2h}$ の次のような既約表現が含まれていることがわかる：$7A_g$，$3B_{1g}$，$3B_{2u}$，$3B_{3u}$．数字は，可約表現の中に各既約表現があらわれる回数を示している：これらの数はまた対応する対称性をもつ準位の核の統計的重みである[1]．

このようにして得られたエチレン分子の状態の分類は全(座標)波動関数の対称性に関係しており，その波動関数は電子，振動および回転部分を含んでいる．しかしながら，異なる観点からこれと同じ結果が得られることは興味深い．すなわち全波動関数の可能な対称性を知ることにより，任意の与えられた電子および振動状態に対して，いかなる回転準位（といかなる統計的重み）が可能であるかを直接見いだすことができる．

たとえば，（実際にはすべての多原子分子で成り立っているように）基底状態の電子波動関数が完全対称であることを仮定して，基底電子項の最底振動準位(励起のない振動)の回転構造を考察しよう．すると対称軸の回りの回転に関する全波動関数の対称性は，回転波動関数の対称性と一致する．これを上で得られた結果と比較すると，次の結論に到達する．すなわちエチレン分子では A および B_1 型（§103 参照）の回転準位は正であり，7 および 3 の統計的重みをもつ．ところが，B_2 および B_3 型の準位は負であり，3 の統計的重みをもつ．

2 原子分子におけると同様（第1巻 319 頁参照），核スピンと電子の相互作用がきわめて弱いために，核の対称性を異にするエチレン分子の状態間の遷移は実際には起こらない．したがって，これらの状態にある分子は，物質の異なる変態のように振舞い，エチレン $C_2^{12}H_4^1$ は 7, 3, 3, 3 の核の統計的重みをもつ四つの変態をもつ．この結論においてたいせつなことは，異なる対称性をもつ状態は異なるエネルギー準位に属するということである（それらの間の間隔は核スピンの相互作用エネルギーに比べて大きい）．それゆえ，同じ縮退エネル

1) エチレン分子中の状態の対称性と四つの H 核の全スピンの値との関係を導くことについては，問題1参照．

ギー準位に属する，核の対称性の異なる状態が存在するような分子に対してはこの結論は成り立たない．

もう一つの例として，対称こまの型のアンモニア分子 $N^{14}H^1_3$ を研究しよう（第41図，対称性の群は $\boldsymbol{C}_{3v}$）．核 N^{14} のスピンは 1，H^1 のスピンは 1/2 である．式（105.2）を用いて，われわれに興味のある群 $\boldsymbol{C}_{3v}$ の表現の指標を得る：

$$\frac{E \quad 2C_3 \quad 3\sigma_v}{24 \quad 6 \quad -12}.$$

それは群 $\boldsymbol{C}_{3v}$ の次のような既約表現を含む：$12A_2$, $6E$. したがって二つの型の準位が可能である；それらの核の統計的重みは12および 6 である[1]．

対称こまの回転準位は（与えられた J に対して）量子数 k の値によって分類される．前の例と同じように，分子 NH_3 の基底電子状態および振動状態の回転構造を考察しよう（すなわち電子波動関数および振動波動関数は完全対称であると仮定する）．回転波動関数の対称性を決定する場合に，軸の回りの回転に関してのみのその振舞いについて語ることが意味があることを考慮しなければならない．ゆえに対称面は，それに垂直な 2 回対称軸によって置きかえられる（対称面での鏡映は，そのような軸の回りの回転とその後で行なう反転と同等である）．したがって，この問題では $\boldsymbol{C}_{3v}$ のかわりにそれと同型の点群 $\boldsymbol{D}_3$ を考察しなければならない．

$k=\pm|k|$ をもつ回転波動関数は，3 回鉛直軸のまわりの回転 C_3 によって $e^{\pm 2\pi i|k|/3}$ が掛けられるが，2 回水平軸のまわりの回転 U_2 によって互いに変換され，したがって群 $\boldsymbol{D}_3$ の 2 次元表現がつくられる．もしも $|k|$ が 3 の倍数でなければ，この表現は既約である；すなわち表現 E である．全波動関数に対応する群 $\boldsymbol{C}_{3v}$ の表現は，項が正であるか負であるかによって，指標 $\chi(U_2)$ にそれぞれ $+1$ または -1 を掛けることによって得られる．しかしながら表現 E においては $\chi(U_2)=0$ であるので，両方の場合にふたたび同じ表現 E を得る（しかしこの場合は群 $\boldsymbol{C}_{3v}$ の表現としてであって，$\boldsymbol{D}_3$ のそれではない）．上で得られた結果を考慮することにより，3 の倍数でない $|k|$ に対して正および負の準位がともに可能であり，核の統計的重みは 6 である（全座標波動関数の対称性が

1）水素の核の全スピン 3/2 は対称性 A_2 の項に対応し，同じく全スピン 1/2 は対称性 E の項に対応する．

$\boldsymbol{E}$ 型の準位である).

3 の倍数である（しかしゼロでない）$|k|$ に対して，回転関数は次の指標をもつ(群 $\boldsymbol{D}_3$ の)表現を与える：

$$\frac{E \quad 2C_3 \quad 3U_2}{2 \quad\ 2 \quad\ \ 0}.$$

この表現は可約であり，表現 A_1, A_2 に分解される．全波動関数が群 $\boldsymbol{C}_{3v}$ の表現 A_2 に属するためには，回転準位 A_1 は負であり，A_2 は正でなければならない．したがって，ゼロでない 3 の倍数である $|k|$ に対しては，正および負の準位がともに可能であり，核の統計的重みは12である(A_2 型の準位).

最後に，角運動量の成分 $k=0$ に対しては，全部でただ一つの回転関数が対応し，それは次の指標をもつ表現を与える[1]：

$$\frac{E \quad 2C_3 \quad 3U_2}{1 \quad\ 1 \quad (-1)^J}.$$

全波動関数が対称性 A_2 をもつためには，反転に関するその振舞いが因子 $(-1)^J$ によって決定されなければならない．したがって $k=0$ に対して，偶数(奇数) の J をもつ準位は負 (正) のみでしかあり得ない；両者の場合の統計的重みは 6 である (A_2 型の準位).

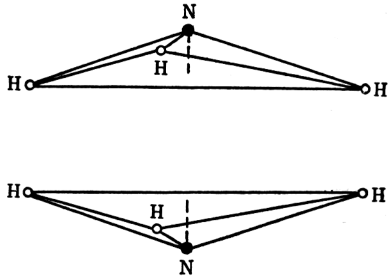
これらの結果を要約すると，$N^{14}H^1_3$ 分子の基底の電子および振動項に対する量子数 k のいろいろな値に対して，可能な状態の次の表が得られる（＋ および － は正および負の状態をあらわす)：

	(+)	(−)
$\|k\|$ は 3 の倍数でない	$6E$	$6E$
$\|k\|$ は 3 の倍数である	$12A_2$	$12A_2$
$k=0$ J は偶数	—	$6A_2$
$k=0$ J は奇数	$6A_2$	—

与えられた J および k に対して，NH_3 分子のエネルギー準位は一般的にいって縮退している（問題 3 の ND_3 に対する表をも見よ). この縮退は，アンモニア分子の平面的な形と水素原子の小さい質量による独特の効果のために，部分的に解かれる．この分子における原子の比較的小さな鉛直方向の変位のため

1) 角度 π だけの回転に対して，大きさ J と投影値ゼロをもつ角運動量の固有関数は $(-1)^J$ を掛けられる．

に，ピラミッドの底面に平行な面での鏡映によって互いに変換される二つの配位間の遷移が実現される（第44図）．これらの遷移は準位の分裂をもたらし，正および負の準位を分離する（これは§50，問題3で考察した1次元の場合と同様の効果である）．分裂の大きさは，分子の二つの配位をへだてている《ポテンシャル障壁》を原子が通過する確率に比例する．アンモニア分子では，上で述べた性質のために，この確率は比較的大きいが，それでも分裂の大きさは小さい (1×10^{-4} eV)．



第 44 図

球状こまの型の分子の例は，本節の問題5で論じられる．

問　　題

1. $C_2^{12}H_4^1$ 分子の状態の対称性とその分子の中の水素核の全スピンとの間の関係を求めよ．

解[1] 四つの H^1 核の全スピンは値 $I=2,1,0$ をとり，その成分 M_I は2から -2 までの値をとる．M_I のおのおのの値に属するスピン因子によって与えられる表現を考察しよう．まず最大の M_I から始めよう．

値 $M_I=2$ は，すべての核がスピン成分 $+1/2$ をもつただ一つのスピン因子に対応する．値 $M_I=1$ は，四つの核のうちどれがスピン成分 $-1/2$ をもつかによって互いに異なる四つのスピン因子に対応する．最後に値 $M_I=0$ は，核のどの対がスピン成分 $-1/2$ をもつかによって，六つのスピン因子によって与えられる．対応する三つの表現の指標は次のようになる：

	E	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$	I	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$
$M_I=2$	1	1	1	1	1	1	1	1
$M_I=1$	4	4	0	0	0	0	0	0
$M_I=0$	6	6	2	2	2	2	2	2

これらの表現のうちの最初のものは恒等表現 A_g である；値 $M_I=2$ は $I=2$ に対してのみ起こるので，スピン $I=2$ に対しては，対称性 A_g をもつ状態が対応すると結論され

1) 置換群の理論に基づいてこの種の問題を解く方法は（第1巻271頁に引用した）Kaplanの本の第VI章§2を参照せよ．

る．

値 $M_I=1$ は $I=1$ と $I=2$ のどちらに対しても起こり得る．これに対応して第2の表現から第1の表現を差し引き，その結果を既約部分に分解すると，スピン $I=1$ に対しては状態 B_{1g}，B_{2u}，B_{3u} が対応する．

最後に値 $M_I=0$ は，$M_I=1$ が可能なすべての状態および $I=0$ に対して起こり得る．これに対応して第3の表現から第2の表現を差し引くと，スピン $I=0$ に対対する二つの状態 A_g が得られる．

2.　分子 $C_2^{12}H_4^2$，$C_2^{13}H_4^1$，$N_2^{14}O_4^{16}$ に対して，全(座標)波動関数の対称性の型および対応する準位の統計的重みを決定せよ（これらすべての分子は同じ形をもっている；スピンは $i(H^2)=1$，$i(C^{13})=1/2$，$i(N^{14})=1$ である)．

解　本文において分子 $C_2^{12}H_4^1$ に対して適用されたのと同じ方法により，次の状態を得る（座標軸は本文と同じように選んだ)：

分　子	(+)	(−)
$C_2^{12}H_4^2$	$27A_g$，$18B_{1g}$	$18B_{2u}$，$18B_{3u}$
$C_2^{13}H_4^1$	$16A_g$，$12B_{1g}$	$12B_{2u}$，$24B_{3u}$
$N_2^{14}O_4^{16}$	$6A_g$	$3B_{3u}$

3.　分子 $N^{14}H_3^2$ に対して前問と同じ計算を行なえ．

解　本文で分子 $N^{14}H_3^1$ に対してなされたのと同じ方法により，次の状態が得られる：$30A_1$，$3A_2$，$24E$.

量子数 k の異なる値に対する基底電子項と振動項に対しては，次の状態が可能である：

	(+)	(−)
$\lvert k\rvert$ が3の倍数でない	$24E$	$24E$
$\lvert k\rvert$ が3の倍数である	$30A_1$，$3A_2$	$30A_1$，$3A_2$
$k=0$ J が偶数	$30A_1$	$3A_2$
$k=0$ J が奇数	$3A_2$	$30A_1$

4.　分子 $C_2^{12}H_6^1$ に対して前問と同じ計算を行なえ（第43図 f)，対称性は D_{3d} である)．

解　次の型の状態が可能である：$7A_{1g}$，$1A_{1u}$，$3A_{2g}$，$13A_{2u}$，$9E_g$，$11E_u$.

基底電子項および振動項に対しては，次の状態が得られる：

	(+)	(−)
$\lvert k\rvert$ が3の倍数でない	$9E_g$	$11E_u$
$\lvert k\rvert$ が3の倍数である	$7A_{1g}$，$3A_{2g}$	$1A_{1u}$，$13A_{2u}$
$k=0$ J が偶数	$7A_{1g}$	$1A_{1u}$
$k=0$ J が奇数	$3A_{2g}$	$13A_{2u}$

5.　メタン分子 $C^{12}H^1_4$ に対して前問と同じ計算を行なえ（H 原子は頂点にあり，C 原子は正四面体の中心にある）．

解　分子は球状こまの型に属し，対称性 $\boldsymbol{T_d}$ をもつ．同じ方法を用いて，次の型の状態が可能であることがわかる：$5A_2$, $1E$, $3F_1$（これに対しては，それぞれ 2, 0, 1 の分子の全スピンが対応する）．

球状こまの回転状態は全角運動量 J の値によって分類される．与えられた J の値に属する $(2J+1)$ 個の回転関数は群 $\boldsymbol{O}$ の $(2J+1)$ 次元の表現を与える．群 $\boldsymbol{O}$ は群 $\boldsymbol{T_d}$ と同型であり，前者を後者から得るには，すべての対称面をそれらに垂直な 2 回軸によって置きかえればよい．この表現の指標は式 (98.3) により決定される．したがって，たとえば $J=3$ に対しては次の指標をもつ表現が得られる：

E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_4^2$
7	1	-1	-1	-1.

この中には群 $\boldsymbol{O}$ の次のような既約表現が含まれる：A_2, F_1, F_2. ふたたび基底電子項および振動項の回転構造を考察すると，$J=3$ に対しては全波動関数の対称性 A_2 をもつ状態は正のみしかあり得ないが，状態 F_1 の準位は正でも負でもあり得る．J の最初のいくつかの値に対しては，このようにして次の状態を得る（それらとともに核の統計的重みも合わせて書く）．

	(+)	(−)
$J=0$	—	$5A_2$
$J=1$	$3F_1$	—
$J=2$	$1E$	$1E$, $3F_1$
$J=3$	$5A_2$, $3F_1$	$3F_1$
$J=4$	$1E$, $3F_1$	$5A_2$, $1E$, $3F_1$

第14章　角運動量の合成

§ 106. 3j-記　号

§31で得られた角運動量の合成則は，角運動量j_1およびj_2をもつ二つの粒子（あるいはもっと複雑な部分）からなる系の全角運動量の可能な値を決定する[1)]．この法則は実際には空間回転に関する波動関数の性質と密接に結びついており，第8章で考察されたスピノールの性質から直接に導かれる．

角運動量j_1およびj_2をもつ粒子の波動関数は，$2j_1$および$2j_2$階の対称スピノールであらわされる．系の波動関数はそれらの積

$$\psi^{(1)}{}_{\overbrace{\lambda\mu\cdots}^{2j_1}}\psi^{(2)}{}_{\overbrace{\rho\sigma\cdots}^{2j_2}} \tag{106.1}$$

で与えられる．この積をすべての添字について対称化し，$2(j_1+j_2)$階の対称スピノールを得る．これが全角運動量j_1+j_2をもつ状態に対応する．つぎに積(106.1)を添字の対について縮約しよう．この対のうちの一つは$\psi^{(1)}$に属し，他は$\psi^{(2)}$に属する（そうでない場合にはゼロが得られる）；このときどちらのスピノール$\psi^{(1)},\psi^{(2)}$も対称なので，$\lambda,\mu,\cdots$および$\rho,\sigma,\cdots$からどの添字をとっても変わりはない．対称化した後に，角運動量j_1+j_2-1をもつ状態に対応する$2(j_1+j_2-1)$階の対称スピノールを得る[2)]．この過程を続けていくと，すで

1) 厳密にいうと，毎回それを断わらないが，相互作用は弱く，1次近似では各角運動量は保存されると考えてよい部分からなる系を考察するものとする．

以下に述べられる結果は，もちろん，二つの粒子（あるいは系）の全角運動量の合成だけでなく，同一の系の軌道角運動量とスピンの合成にもあてはまるものである．このときはスピン-軌道結合が十分弱いことを仮定している．

2) 誤解を避けるために次のような注意をするとよい．2粒子系の波動関数はいつも$2(j_1+j_2)$階のスピノールで，これは一般に$2j$とは異なっている．ここでjは系の全角運動量である．しかしながら，このようなスピノールはこれより低次のスピノールと同値であり得る．たとえば角運動量$j_1=j_2=1/2$をもつ2粒子系の波動関数は2階のスピノールである；しかしもしも全角運動量$j=0$ならば，このスピノールは反対称でスカラーになる．一般に，全角運動量jにより系のスピノール波動関数の対称性が決定される：それは$2j$個の添字に関し対称で，その他の添字に関し反対称である．

によく知られた規則に一致して，j が j_1+j_2 から $|j_1-j_2|$ の値を一回ずつ取ることがわかる．

数学的観点から，回転群の二つの（次元がそれぞれ $2j_1+1$ および $2j_2+1$）の既約表現の直積 $D^{(j_1)}\times D^{(j_2)}$ の既約部分への分解のことである．その述語を使うと，角運動量の合成則は直積分解の形に書かれる：

$$D^{(j_1)}\times D^{(j_2)}=D^{(j_1+j_2)}+D^{(j_1+j_2-1)}+\cdots+D^{(|j_1-j_2|)}.$$

角運動量の合成の問題を完全に解くためには，与えられた値の全角運動量をもつ系の波動関数を，それを構成する2粒子の波動関数から組み立てる問題を考察する必要がある．

もっとも簡単な場合から始めよう．それは，角運動量の総和がゼロに等しいような二つの角運動量の合成である．このときは $j_1=j_2$ で，角運動量の投影は $m_1=-m_2$ でなければならないことは明らかである．ψ_{jm} が角運動量 j，その投影 m をもつ1個の粒子の規格化された（非スピノール表示の）波動関数であるとしよう．求める系の関数 ψ_0 は，逆符号の m をもった2粒子の波動関数の積の和であらわされる：

$$\psi_0=\frac{1}{\sqrt{2j+1}}\sum_{m=-j}^{j}(-1)^{j-m}\psi_{jm}^{(1)}\psi_{j,-m}^{(2)} \tag{106.2}$$

（j は j_1 および j_2 の共通の値である）．和のまえの因子は規格化の結果である．和のなかの係数に関しては，それらはすべて絶対値が等しくなければならない．それは粒子の角運動量の投影値 m はすべて同じ確率でなければならないという理由による．(106.2) のなかの符号の交代の規則は，波動関数のスピノール表示を使って容易に求められる．スピノール記法では，(106.2) のなかの和はスカラー

$$\psi^{(1)\lambda\mu\cdots}\psi^{(2)}_{\lambda\mu\cdots} \tag{106.3}$$

である（全角運動量がゼロになる!）．これは $2j$ 階の二つのスピノールからつくられる．このことに気がつけば，(106.2) の符号は公式 (57.3) からただちに求められる．

しかしながら，一般的にいうと和 (106.2) の項の相対的符号だけが一意的であり，全体の符号は角運動量の《合成の順序》に依存することを念頭に置く必要がある．事実，もしも $\psi^{(1)}$ のすべてのスピノール添字（このなかの $j+m$ 個

が1で$j-m$個が2である）を下げ，$\psi^{(2)}$のそれを上げると，スカラー（106. 3）には$(-1)^{2j}$が掛けられる；すなわち，半整数のjに対しては符号が変わる．

つぎに角運動量j_1, j_2, j_3およびその投影m_1, m_2, m_3をもつ3粒子から構成される，全角運動量がゼロに等しい系を考察しよう．全角運動量がゼロに等しい条件は次のような意味をもっている．すなわち，$m_1+m_2+m_3=0$およびj_1, j_2, j_3が，これらのなかのどれもが他の二つのベクトル合成によりつくられるような値をもつことである．すなわち，幾何学的にはj_1, j_2, j_3が閉じた3角形の辺にならなければならない；いいかえれば，これらのいずれもが，他の二つの差より小さくなく，和より大きくない：

$$|j_1-j_2| \leqq j_3 \leqq j_1+j_2 \quad 等.$$

このとき代数和$j_1+j_2+j_3$が整数になることも明らかである．

いま考えている系の波動関数は次の和の形になる：

$$\psi_0 = \sum_{m_1 m_2 m_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \psi^{(1)}_{j_1 m_1} \psi^{(2)}_{j_2 m_2} \psi^{(3)}_{j_3 m_3}. \qquad (106.4)$$

和はいずれも各m_iの$-j_i$からj_iの範囲内の値について行なわれる．この式のなかの係数は**ウィグナーの3j-記号**と呼ばれる．定義により，これは条件

$$m_1+m_2+m_3=0$$

のときにのみゼロと異なる．

添字1, 2, 3の交換に対して，波動関数（106. 4）は重要でない位相因子だけ変わり得る．事実3j-記号は純実数になるように定義できる（下記参照）．そしてψ_0の非一意性は（関数（106. 2）におけるのと同様に），その全体の符号の不定性だけにすることができる．これは3j-記号の列の交換は，それを不変のままに保つか，その符号を変えるかのいずれかであることを意味している．

3j-記号を定義するのに使われる和（106. 4）のなかの係数の，もっとも対称的な定義の仕方は次のようなものである．スピノール記法でψ_0は，三つのスピノール$\psi^{(1)\lambda\mu\cdots}$, $\psi^{(2)\lambda\mu\cdots}$, $\psi^{(3)\lambda\mu\cdots}$の積を，それぞれ異なる二つのスピノールから一つずつとった添字対のすべてについて縮約したものからつくられるスカラーであらわされる．粒子*1*および*2*に関する対のおのおのでは，スピノール添字は$\psi^{(1)}$では上に，$\psi^{(2)}$では下に；粒子*2*および*3*に関する対では，$\psi^{(2)}$では

上に，$\psi^{(3)}$ では下に；粒子 *3* および *1* に関する対では，$\psi^{(3)}$ では上に，$\psi^{(1)}$ では下に書くことにする（これらの《種類》のおのおのの対の数は，全部でそれぞれ $j_1+j_2-j_3, j_2+j_3-j_1$ および $j_1+j_3-j_2$ 個あることが容易に計算される）．これらの規則から ψ_0 の符号は一意的に定義される．

このような定義のときに，添字 1, 2, 3 の循環置換は ψ_0 を不変のままにすることは明らかである．これは 3*j*–記号がその列の循環置換に対して不変であることを意味している．ところが（任意の）二つの添字の交換は，容易にわかるように，必然的に合計 $j_1+j_2+j_3$ 個の対で下の添字を上げ，上の添字を下げることになる．これは ψ_0 に因子 $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$ が掛けられることを意味する；いいかえれば，3*j*–記号は次の性質をもつことになる：

$$\begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \quad 等. \tag{106.5}$$

すなわち，$j_1+j_2+j_3$ が奇数ならば，3*j*–記号は二つの列を交換すると符号が変わる．

最後に，容易にわかるように

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \tag{106.6}$$

である．実際に，すべての角運動量の z–成分の符号の変化は，y 軸のまわりの角度 π の回転の結果とみなされる．ところが，このような変換はすべての下のスピノール添字を上げ，上の添字を下げることと同等である（(58.5) 参照）．

式 (106.4) から，与えられた j および m をもつ 2 粒子系の波動関数 ψ_{jm} を定義する重要な公式へ移ることができる．このためには，粒子 *1* および *2* の組を一つの系とみなそう．この系の角運動量 $\boldsymbol{j}$ は粒子 *3* の角運動量 $\boldsymbol{j}_3$ とともに全角運動量ゼロに合成されるので，$j=j_3$, $m=-m_3$ でなければならない．ここで (106.2) に従って

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \sum_m (-1)^{j-m} \psi_{jm} \psi^{(3)}_{j,-m} \tag{106.7}$$

と書くことができる．式 (106.4) を（j_3, m_3 のかわりに $j, -m$ と書いて）この式と比べる必要がある．しかしながら，このとき (106.7) の和の合成則は，(106.3) に従い，和 (106.4) の合成則には対応しないことをあらかじめ考慮す

る必要がある．(106.7) から (106.4) に移るためには，容易にわかるように，粒子 *1* および *3* に対応する対のなかの上下の添字を入れかえる必要がある．これは余分の因子 $(-1)^{j_1-j_2+j_3}$ の出現をもたらす．その結果

$$\psi_{jm}=(-1)^{j_1-j_2+m}\sqrt{2j+1}\sum_{m_1,m_2}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix}\psi^{(1)}_{j_1m_1}\psi^{(2)}_{j_2m_2} \qquad (106.8)$$

を得る[1]．ここで m_1 および m_2 についての和は，条件 $m_1+m_2=m$ を考慮して行なわれる．

公式 (106.8) は，確定した角運動量 j_1 および j_2 をもつ二つの粒子の波動関数を使った，系の波動関数の求める展開式を与える．これは次の形に書ける：

$$\psi_{jm}=\sum_{m_1,m_2}\langle m_1 m_2 \,|\, jm\rangle\ \psi^{(1)}_{j_1m_1}\psi^{(2)}_{j_2m_2},\qquad m_2=m-m_1. \qquad (106.9)$$

係数

$$\langle m_1m_2|jm\rangle=(-1)^{j_1-j_2+m}\sqrt{2j+1}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} \qquad (106.10)$$

は，(j_1, j_2 の値が与えられた際の) 状態 $|m_1m_2\rangle$ の $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 個の波動関数の規格直交完全系から，状態 $|jm\rangle$ の関数系への変換行列をなしている．これらを**ベクトル結合係数**あるいは**クレプシュ＝ゴルダン係数**と呼ぶ．記号 $\langle m_1m_2|jm\rangle$ による記法は，ある関数系を他の系で展開する係数の一般的記法 (11.18) に対応している．書き方を簡単にするためにわれわれは j_1, j_2 という数を落とした．必要なときにはこれらの数は記号に入れられて $\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm\rangle$ となる[2]．

変換行列 (106.9) はユニタリである (§12参照)．したがって，逆変換係数

$$\psi^{(1)}_{j_1m_1}\psi^{(2)}_{j_2m_2}=\sum_{j=|j_2-j_1|}^{j_1+j_2}\langle j, m_1+m_2\,|\,m_1m_2\rangle\ \psi_{j,m_1+m_2} \qquad (106.11)$$

は変数係数 (106.9) の複素共役である．先へ行って，これらの係数が実数であることがわかる．したがって単に

$$\langle m_1m_2|jm\rangle=\langle jm\,|\,m_1m_2\rangle$$

である．量子力学の一般則に従って，(106.11) の展開係数の自乗は，(j_1, m_1

---

1) 時間反転に対し波動関数は (60.2)に従って変えられる．すなわち $\psi_{j,m}\to(-1)^{j-m}\psi_{j,-m}$. このような変換に対して，(106.8) の右辺の関数 $\psi_{j_1m_1}$, $\psi_{j_2m_2}$ は，左辺の関数 ψ_{jm} とまったく同様に変換される．

2) 文献ではクレプシュ＝ゴルダン係数に対してまた記号 $C^{jm}_{m_1m_2}$ あるいは $C^{jm}_{j_1m_1j_2m_2}$ が用いられる．

および j_2, m_2 が与えられたとき）系が j と m のある値をとる確率を与える．

変換 (106.9) のユニタリ性は，その係数が一定の直交条件を満足することを意味する．公式 (12.5)-(12.6) に従って次のようになる：

$$\sum_{m_1, m_2} \langle m_1 m_2 | jm \rangle \langle m_1 m_2 | j' m' \rangle$$
$$= (2j+1) \sum_{m_1, m_2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j' \\ m_1 & m_2 & -m' \end{pmatrix} = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (106.12)$$

$$\sum_{j, m} \langle m_1 m_2 | jm \rangle \langle m_1' m_2' | jm \rangle$$
$$= \sum_{j, m} (2j+1) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1' & m_2' & -m \end{pmatrix} = \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'}. \quad (106.13)$$

$3j$-記号のあらわな式は非常に長い．これは次の形にあらわされる[1]：

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \left[\frac{(j_1+j_2-j_3)!(j_1-j_2+j_3)!(-j_1+j_2+j_3)!}{(j_1+j_2+j_3+1)!} \right]^{1/2}$$
$$\times ([j_1+m_1)!(j_1-m_1)!(j_2+m_2)!(j_2-m_2)!(j_3+m_3)!(j_3-m_3)!]^{1/2}$$
$$\times \sum_z \{[(-1)^{z+j_1-j_2-m_3}][z!(j_1+j_2-j_3-z)!(j_1-m_1-z)!$$
$$\times (j_2+m_2-z)!(j_3-j_2+m_1+z)!(j_3-j_1-m_2+z)!]^{-1}\}. \quad (106.14)$$

和は z のすべての整数値について行なわれる；しかしながら，負数の階乗は ∞ に等しいので，和のなかの項の数は実際には有限である．和の前の係数は添字 1, 2, 3 についてあらわに対称形である；これに対し和の対称性は，和の変数 z のてきとうな書き換えを行なうとわかる．

$3j$-記号はその定義から簡単に出てくる対称性 (106.5), (106.6) のほかにも，まだ対称性をもっている．しかしながら，この導き方は非常に複雑なので，われわれはここでそれを導くことはしない．$3j$-記号のパラメーターと結びついた (3×3) の方形数表を次のように導入すると，これらの性質を定式化するのに好都合である：

---

1) 展開係数 (106.9) は最初ウィグナーにより計算された (E. Wigner, 1931)．これらの係数の対称性およびこれに対する対称な式 (106.14) はラカーにより求められた (G. Racah, 1942)．もっとも直接的な計算法は，たぶん（適当に規格化された）スピノール表示 ψ_0 から，対応の公式 (57.6) を使って，和 (106.4) の形の表示に直接移ることであろう（この公式 (58.1) の係数が実数であることは，$3j$-記号が実数であることを自動的に導くことに注意しよう．他の導き方が次のエドモンズの本に与えられている（第1巻252頁の脚注参照）．528-529頁の $3j$-記号の表はこの本から引用した．

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} j_2+j_3-j_1 & j_3+j_1-j_2 & j_1+j_2-j_3 \\ j_1-m_1 & j_2-m_2 & j_3-m_3 \\ j_1+m_1 & j_2+m_2 & j_3+m_3 \end{bmatrix} \quad (106.15)$$

(この表の各行，各列の数の和は $j_1+j_2+j_3$ である). こうすると，1) この表の任意の2列の交換は3j-記号に $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$ を掛ける (この性質は (106.5) と一致する); 2) 任意の二つの行の交換に対しても同じことが成り立つ (下の2行に関しては，この性質は (106.6) と一致する); 3) 3j-記号はこの表の行と列を入れかえても変わらない[1].

いくつかの特別の場合に対して，簡単な公式を書き出そう.

$$\begin{pmatrix} j & j & 0 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{j-m}\frac{1}{\sqrt{2j+1}} \quad (106.16)$$

の値は (106.2) に対応する. 公式

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_1+j_2 \\ m_1 & m_2 & -m_1-m_2 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1-j_2+m_1+m_2}$$
$$\times\left[\frac{(2j_1)!(2j_2)!(j_1+j_2+m_1+m_2)!(j_1+j_2-m_1-m_2)!}{(2j_1+2j_2+1)!(j_1+m_1)!(j_1-m_1)!(j_2+m_2)!(j_2-m_2)!}\right]^{1/2}, \quad (106.17)$$

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_1 & -j_1-m_3 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{-j_1+j_2+m_3}$$
$$\times\left[\frac{(2j_1)!(-j_1+j_2+j_3)!(j_1+j_2+m_3)!(j_3-m_3)!}{(j_1+j_2+j_3+1)!(j_1-j_2+j_3)!(j_1+j_2-j_3)!(-j_1+j_2-m_3)!(j_3+m_3)!}\right]^{1/2}$$

は (106.14) から直接に求められる. $2p=j_1+j_2+j_3$ が偶数のとき，公式

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = (-1)^p\left[\frac{(j_1+j_2-j_3)!(j_1-j_2+j_3)!(-j_1+j_2+j_3)!}{(2p+1)!}\right]^{1/2}$$
$$\times\frac{p!}{(p-j_1)!(p-j_2)!(p-j_3)!} \quad (106.18)$$

の導き方は，かなりの付加的計算を必要とする[2] ($2p$ が奇数のとき，この3j-記号は対称性 (106.6) によりゼロとなる).

第9表には便利のために $j_3=1/2$, 1, 3/2, 2 に対する3j-記号の値があげて

---

1) T. Regge, Nuovo Cimento, **10**, 544 (1958); **11**, 116 (1959). (106.15) の対称性のより深遠な数学的側面は(後述の6j-記号の (108.3) の対称性も同様)ヤ・ア・スマロディンスキー Я. А. Смородинский とエリ・ア・シェレピン Л. А. Шелепин の論文集 (УФН, **106**, 3 (1972)) にある.

2) 前記エドモンズの著書に示されている.

第9表　3j-記号の公式

$$\begin{pmatrix} j+\frac{1}{2} & j & \frac{1}{2} \\ m & -m-\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = (-1)^{j-m-1/2}\left[\frac{j-m+\frac{1}{2}}{(2j+1)(2j+2)}\right]^{1/2}$$

$$(-1)^{j-m}\begin{pmatrix} j_1 & j & 1 \\ m & -m-m_3 & m_3 \end{pmatrix}$$

j_1 \ m_3	0
j	$\dfrac{2m}{[2j(2j+1)(2j+2)]^{1/2}}$
$j+1$	$-\left[\dfrac{2(j+m+1)(j-m+1)}{(2j+1)(2j+2)(2j+3)}\right]^{1/2}$

j_1 \ m_3	1
j	$\left[\dfrac{2(j-m)(j+m+1)}{2j(2j+1)(2j+2)}\right]^{1/2}$
$j+1$	$-\left[\dfrac{(j-m)(j-m+1)}{(2j+1)(2j+2)(2j+3)}\right]^{1/2}$

$$(-1)^{j-m+1/2}\begin{pmatrix} j_1 & j & \frac{3}{2} \\ m & -m-m_3 & m_3 \end{pmatrix}$$

j_1 \ m_3	$\frac{1}{2}$
$j+\frac{1}{2}$	$-\left(j+3m+\frac{3}{2}\right)\left[\dfrac{j-m+\frac{1}{2}}{2j(2j+1)(2j+2)(2j+3)}\right]^{1/2}$
$j+\frac{3}{2}$	$\left[\dfrac{3\left(j-m+\frac{1}{2}\right)\left(j-m+\frac{3}{2}\right)\left(j+m+\frac{3}{2}\right)}{(2j+1)(2j+2)(2j+3)(2j+4)}\right]^{1/2}$

$j_1 \backslash m_3$	$\frac{3}{2}$
$j+\frac{1}{2}$	$-\left[\frac{3\left(j-m-\frac{1}{2}\right)\left(j-m+\frac{1}{2}\right)\left(j+m+\frac{3}{2}\right)}{2j(2j+1)(2j+2)(2j+3)}\right]^{1/2}$
$j+\frac{3}{2}$	$\left[\frac{\left(j-m-\frac{1}{2}\right)\left(j-m+\frac{1}{2}\right)\left(j-m+\frac{3}{2}\right)}{(2j+1)(2j+2)(2j+3)(2j+4)}\right]^{1/2}$

$$(-1)^{j-m}\begin{pmatrix} j_1 & j & 2 \\ m & -m-m_3 & m_3 \end{pmatrix}$$

$j_1 \backslash m_3$	0
j	$\frac{2[3m^2-j(j+1)]}{[(2j-1)2j(2j+1)(2j+2)(2j+3)]^{1/2}}$
$j+1$	$-2m\left[\frac{6(j+m+1)(j-m+1)}{2j(2j+1)(2j+2)(2j+3)(2j+4)}\right]^{1/2}$
$j+2$	$\left[\frac{6(j+m+2)(j+m+1)(j-m+2)(j-m+1)}{(2j+1)(2j+2)(2j+3)(2j+4)(2j+5)}\right]^{1/2}$

$j_1 \backslash m_3$	1
j	$(1+2m)\left[\frac{6(j+m+1)(j-m)}{(2j-1)2j(2j+1)(2j+2)(2j+3)}\right]^{1/2}$
$j+1$	$-2(j+2m+2)\left[\frac{(j-m+1)(j-m)}{2j(2j+1)(2j+2)(2j+3)(2j+4)}\right]^{1/2}$
$j+2$	$2\left[\frac{(j+m+2)(j-m+2)(j-m+1)(j-m)}{(2j+1)(2j+2)(2j+3)(2j+4)(2j+5)}\right]^{1/2}$

$j_1 \backslash m_3$	2
j	$\left[\frac{6(j-m-1)(j-m)(j+m+1)(j+m+2)}{(2j-1)2j(2j+1)(2j+2)(2j+3)}\right]^{1/2}$
$j+1$	$-2\left[\frac{(j-m-1)(j-m)(j-m+1)(j+m+2)}{2j(2j+1)(2j+2)(2j+3)(2j+4)}\right]^{1/2}$
$j+2$	$\left[\frac{(j-m-1)(j-m)(j-m+1)(j-m+2)}{(2j+1)(2j+2)(2j+3)(2j+4)(2j+5)}\right]^{1/2}$

ある．各 j_3 に対し必要最小限の数の 3j-記号が示してある；これから関係式 (106.5) と (106.6) を使って，他は求めることができる．

問　題

軌道角運動量 l，全角運動量 j およびその投影 m が与えられた値をもつ状態にある，スピン 1/2 の粒子の波動関数の角度依存性を決定せよ．

解　この問題は一般公式 (106.8) を使って解かれる．ここで $\psi^{(1)}$ は軌道角運動量の固有関数（すなわち，球関数 Y_{lm_l}），$\psi^{(2)}$ はスピン波動関数 $\chi(\sigma)$（ここで $\sigma=\pm1/2$）と考える必要がある．すなわち

$$\psi_{jm}=(-1)^{l+m-1/2}\sqrt{2j+1}\sum_{\sigma}\begin{pmatrix} l & 1/2 & j \\ m-\sigma & \sigma & -m\end{pmatrix}Y_{l,m-\sigma}\chi(\sigma)$$

である．3j-記号の値を代入して次式を得る：

$$\psi_{l+1/2,m}=\sqrt{\frac{j+m}{2j}}\chi\left(\frac{1}{2}\right)Y_{l,m-1/2}+\sqrt{\frac{j-m}{2j}}\chi\left(-\frac{1}{2}\right)Y_{l,m+1/2},$$

$$\psi_{l-1/2,m}=-\sqrt{\frac{j-m+1}{2j+2}}\chi\left(\frac{1}{2}\right)Y_{l,m-1/2}+\sqrt{\frac{j+m+1}{2j+2}}\chi\left(-\frac{1}{2}\right)Y_{l,m+1/2}.$$

§ 107. テンソルの行列要素

§29 では，ベクトル物理量の行列要素の，角運動量の投影値への依存性を決める公式が得られた．これらの公式は，実際には，任意の階数の既約テンソル（第 1 巻 247 頁参照）に対する同様な問題の解を与える一般公式の特別な場合である[1]．

k 階の既約テンソル（k は整数）の $2k+1$ 個の成分の組はその変換性に関しては，$2k+1$ 個の球関数 Y_{kq} ($q=-k, \cdots, k$) の組と同等である（第 1 巻 247 頁の脚注参照）．これは，テンソル成分の適当な 1 次結合をつくることにより，回転の際に関数 Y_{kq} と同様に変換する量の組を得ることを意味する．このような量の組をここでは f_{kq} を書くことにし，k 階の**球面テンソル**と呼ぼう．

たとえば $k=1$ はベクトルに対応するので，量 f_{1q} はベクトル成分と次の公式で結ばれる：

$$f_{10}=ia_z, \qquad f_{1,\pm1}=\mp\frac{i}{\sqrt{2}}(a_x\pm ia_y) \tag{107.1}$$

---

1)　§107–§109 で考察される問題の検討およびそこで述べられる結果の大部分はラカーによる (G. Racah, 1942–1943).

((57.7) と比べよ). 2階のテンソルに対する同様な公式は

$$f_{20}=-\sqrt{\frac{3}{2}}a_{zz}, \qquad f_{2,\pm1}=\pm(a_{xz}\pm ia_{yz}),$$
$$f_{2,\pm2}=-\frac{1}{2}(a_{xx}-a_{yy}\pm2ia_{xy}) \tag{107.2}$$

の形になる (ここで $a_{xx}+a_{yy}+a_{zz}=0$ である)[1].

二つ (あるいはそれ以上) の球面テンソル $f_{k_1q_1}$, $f_{k_2q_2}$ のテンソル積をつくるには, 角運動量の合成則と同じように行なう; その際 k_1, k_2 は形式的にこれらのテンソルに対応する《角運動量》の役割を演ずる. このようにして, 階数 k_1, k_2 の二つの球面テンソルから $K=k_1+k_2, \cdots, |k_1-k_2|$ 階の球面テンソルを, 次の公式に従ってつくることができる:

$$(f_{k_1}g_{k_2})_{KQ}=\sum_{q_1q_2}\langle q_1q_2|KQ\rangle f_{k_1q_1}g_{k_2q_2}$$
$$=(-1)^{k_1-k_2+Q}\sqrt{2K+1}\sum_{q_1q_2}\begin{pmatrix}k_1 & k_2 & K\\ q_1 & q_2 & -Q\end{pmatrix}f_{k_1q_1}g_{k_2q_2} \tag{107.3}$$

((106.9) と比べよ). しかしながら, 同じ k 階の二つの球面テンソルのスカラー積はふつうは次のようにつくられる:

$$(f_kg_k)_{00}=\sum_q(-1)^{k-q}f_{kq}g_{k,-q}. \tag{107.4}$$

これは公式 (107.3) で $K=Q=0$ と置いた定義と, 因子 $\sqrt{2k+1}$ だけ異なる ((106.2) と比べよ)[2]. この定義はまた, 球面テンソルの複素共役が, 変換則 $f^*_{kq}=(-1)^{k-q}f_{k,-q}$ ((28.9) と比べよ)[3] によって作られることに気がつけば,

$$(f_kg_k)_{00}=\sum_q f_{kq}g^*_{kq}$$

の形にあらわすことができる.

球面テンソルの形で物理量をあらわすことは, 行列要素の計算をするのに特別に便利である; それによって角運動量の合成の理論の結果を, その目的のた

---

1) 量 f_{kq} が複素数であることは球面成分に移ることと関係していること, すなわち, もとのテンソルのデカルト成分は実数であることを意味している.

2) もしも $\boldsymbol{A}$ および $\boldsymbol{B}$ が, 公式 (107.1) による球面テンソル f_{1q} および g_{1q} に対応するベクトルとすれば,

$$(f_1g_1)_{00}=\boldsymbol{AB}$$

である.

3) 公式 (106.8) に関してつけた脚注をここでも繰り返そう. この法則があるので (107.3) の右辺にある階数 k_1 および k_2 のテンソルの複素共役は, その左辺にある階数 K のテンソルの複素共役へと導かれる.

めに直接利用することができるからである．

行列要素の定義から

$$\hat{f}_{kq}\psi_{njm}=\sum_{n'j'm'}\langle n'j'm'|f_{kq}|njm\rangle\psi_{n'j'm'} \qquad (107.5)$$

を得る．ここで ψ_{njm} は，角運動量の大きさ j，その投影 m，および残りの量子数の組 n で特徴づけられる系の定常状態の波動関数である．その変換性に関して，等式 (107.5) の右辺と左辺の関数は，等式 (106.11) の右辺と左辺の関数に対応する．これからただちに次の選択規則が出る：

k 階の既約テンソルの成分 f_{kq} の行列要素は，《角運動量の合成則》$\boldsymbol{j'=j+k}$ を満足する遷移 $jm\to j'm'$ に対してのみゼロと異なる．このとき数 j', j, k は《三角形の法則》(すなわち，閉じた3角形の辺の長さになり得る) を満足する，そして $m'=m+q$ である．とくに対角行列要素は条件 $2j\geqslant k$ のときにのみゼロと異なり得る．

さらに同じ変換の類似性から，和 (107.5) の係数が (106.11) の係数に比例しなければならない (**ウィグナー＝エッカルトの定理**)．これにより係数の m, m' への依存性が決定され，これに応じて行列要素を次の形にあらわそう：

$$\langle n'j'm'|f_{kq}|njm\rangle=i^k(-1)^{j_{\max}-m'}\begin{pmatrix} j' & k & j \\ -m' & q & m\end{pmatrix}\langle n'j'\|f_k\|nj\rangle \qquad (107.6)$$

($j_{\max}$ は j と j' のうちの大きい方である)．ここで $\langle n'j'\|f_k\|nj\rangle$ は m, m', q には依存しない量である．これを**既約行列要素**と呼ぶ．この公式が，行列要素の角運動量の投影への依存性を決定するという提起された問題の解になっている．この依存性は回転群に対する対称性と完全に結びついたものであることがわかる．これに反し，残りの量子数への依存性は量 f_{kq} 自身の物理的本性ですでに決定されている[1]．

演算子 f_{kq} は互いに関係式

$$\hat{f}^{+}_{kq}=(-1)^{k-q}\hat{f}_{k,-q} \qquad (107.7)$$

で結ばれる．したがって，行列要素に対しては等式

$$\langle n'j'm'|f_{kq}|njm\rangle^{*}=(-1)^{k-q}\langle njm|f_{k,-q}|n'j'm'\rangle \qquad (107.8)$$

が成り立つ．ここに (107.6) を代入し，(106.5)，(106.6) の $3j$-記号の性質

---

1) とくに得られた結果からただちに，§29 で述べられた，ベクトルの行列要素に対する選択則やそれらに対する公式 (29.7)-(29.9) が得られる．

を使うと，既約行列要素に対する《エルミート性》の関係式を得る[1]：

$$\langle n'j'\|f_k\|nj\rangle=\langle nj\|f_k\|n'j'\rangle^*. \tag{107.9}$$

スカラー (107.4) の行列要素は j および m について対角的である．行列の乗算規則に従って

$$\langle n'jm|(f_kg_k)_{00}|njm\rangle = \sum_q (-1)^{k-q} \sum_{n''j''m''} \langle n'jm|f_{kq}|n''j''m''\rangle\langle n''j''m''|g_{k,-q}|njm\rangle$$

が成り立つ．ここに式 (107.6) を代入し，3j-記号の直交関係 (106.12) を使って，q と m'' についての和をとると，次の公式を得る：

$$\langle n'jm|(f_kg_k)_{00}|njm\rangle=\frac{1}{2j+1}\sum_{n''j''}\langle n'j\|f_k\|n''j''\rangle\langle n''j''\|g_k\|nj\rangle. \tag{107.10}$$

同様にして，行列要素の自乗の和の次のような公式が容易に得られる：

$$\sum_{qm'}|\langle n'j'm'|f_{kq}|njm\rangle|^2=\frac{1}{2j+1}|\langle n'j'\|f_k\|nj\rangle|^2, \tag{107.11}$$

$$\sum_{mm'}|\langle n'j'm'|f_{kq}|njm\rangle|^2=\frac{1}{2k+1}|\langle n'j'\|f_k\|nj\rangle|^2. \tag{107.12}$$

これらのうち前の式では，与えられた m に対して和は q および m' について行なわれ，後の式では与えられた q に対して和は m および m' について行なわれる（ここでいつも $m'=m+q$ である）．

参考のために，f_{kq} が球関数 Y_{kq} である場合を考え，一つの粒子について整数の軌道角運動量 l_1 および l_2 をもつ，状態間の遷移に対する行列要素の式を与えよう．いいかえれば，積分

$$\langle l_1m_1|Y_{lm}|l_2m_2\rangle=\int Y^*_{l_1m_1}Y_{lm}Y_{l_2m_2}do \tag{107.13}$$

を計算する必要がある．これらの行列要素に対しては，角運動量の合成則 ($\boldsymbol{l}+\boldsymbol{l}_2=\boldsymbol{l}_1$) に対応する選択規則の他に次のような選択規則がある：それによると和 $l+l_1+l_2$ が偶数でなければならない．これは偶奇性の保存によるものである：それによると，二つの状態の偶奇性の積 $(-1)^{l_1+l_2}$ は，いま考えられている物理量の偶奇性 $(-1)^l$ と一致する必要がある（§30 参照）．

行列要素 (107.13) は，§110 で計算されるより一般的な場合の特別な場合である（543頁脚注参照）．それらは次式で与えられる：

---

1) 定義 (107.6) の位相因子はこの等式が成立つように選ばれた．

$$\langle l_1m_1|Y_{lm}|l_2m_2\rangle = (-1)^{m_1}i^{-l_1+l_2+l}\begin{pmatrix} l_1 & l & l_2 \\ -m_1 & m & m_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_1 & l & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\left[\frac{(2l+1)(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi}\right]^{1/2} \tag{107.14}$$

で与えられる．とくに $m_1=m_2=m=0$ のときは三つのルジャンドル多項式の積の積分値になる

$$\int_{-1}^{1} P_l(\mu)P_{l_1}(\mu)P_{l_2}(\mu)d\mu = 2\begin{pmatrix} l_1 & l & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \tag{107.15}$$

§ 108.　6j-記　号

われわれは§106で，全角運動量がゼロに等しい3粒子系の波動関数をあらわす和（106.4）の係数として，3j-記号を定義した．回転に関する変換性の観点から，この和はスカラーである．これから，与えられた j_1, j_2, j_3（および可能なすべての m_1, m_2, m_3）をもつ3j-記号の組は，回転に際し積 $\psi_{j_1m_1}\psi_{j_2m_2}\psi_{j_3m_3}$ の変換則と反傾*) な変換則に従う量の組とみなすことができる．そうすれば，全体の和の不変性を保証することになる．

この観点に関連して，3j-記号だけからなるスカラー量をつくる問題を提起することができる．このようなスカラーは量子数 j のみに依存し，回転の際に変化する量子数 m には依存しない．いいかえると，それはすべての量子数 m についての和の形にあらわされなければならない．このような和はいずれも，二つの3j-記号の積の法則

$$\sum_m (-1)^{j-m}\begin{pmatrix} j & \cdot & \cdot \\ m & \cdot & \cdot \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j & \cdot & \cdot \\ -m & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \tag{108.1}$$

に従う《縮約》からなっている（スカラー（106.2）をつくる方法と比べよ）．

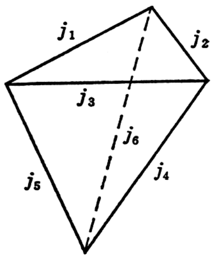
どの《縮約》にも量子数 m の対があらわれるので，完全なスカラーをつくるためには，偶数個の3j-記号の積を考察する必要がある．2つの3j-記号の縮約は，その直交性のために次のような無意味な結果へと導く：

$$\sum_{m_1m_2m_3}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix}(-1)^{j_1+j_2+j_3-m_1-m_2-m_3} = \sum_{m_1m_2m_3}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}^2 = 1$$

---

*)　コントラグラジェントの意．（訳者）

(ここで等式 $m_1+m_2+m_3=0$, および公式 (106.6), (106.12) が使われた). したがって, 無意味でないスカラーを得るために必要な因子の最小限の数は4である. 各 $3j$-記号では3個の量子数 j が閉じた3角形を形成する. 《縮約》の際に量子数 j はいずれも二つの $3j$-記号であらわされる必要があるので, すぐわかることだが, 4個の $3j$-記号からスカラーをつくるためには6個の量子数 j があらわれ, それらは幾何学的に正4面体でない4面体の稜の長さとして描かれる必要がある (第45図): $3j$-記号のおのおのはその面の一つに対応する. 求めるスカラーの定義のなかでは, 縮約の過程の遂行に関して一定の条件が使われる; その条件は次の公式であらわされる:



第 45 図

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{Bmatrix} = \sum_{\text{all } m} (-1)^{\sum_i (j_i - m_i)} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix}$$

$$\times \begin{pmatrix} j_1 & j_5 & j_6 \\ m_1 & -m_5 & m_6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_4 & j_2 & j_6 \\ m_4 & m_2 & -m_6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_4 & j_5 & j_3 \\ -m_4 & m_5 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (108.2)$$

和はここではすべての m のすべての可能な値について行なわれる; しかしながら, 各 $3j$-記号のなかの三つの m の和はゼロに等しくなければならないので, 実際には6個の m のなかの三つだけが独立である. 公式 (108.2) で定義される量を **$6j$-記号**あるいは**ラカー係数**と呼ぶ[1].

定義 (108.2) から, $3j$-記号の性質を考慮すれば, $6j$-記号はその三つの列の任意の交換の際に変わらないこと, またどの列の対のなかでも上の数と下の数を交換することができること[2]が容易に確かめられる. これらの対称性のために, $6j$-記号のなかの数 $j_1, \cdots, j_6$ の順序は24の同等な形になり得る[3]. この他に $6j$-記号は, あまり意味の明瞭でない対称性をもう一つもっている; この対

1) 文献ではまた, 記号

$$W(j_1 j_2 j_5 j_4 ; j_3 j_6) = (-1)^{j_1+j_2+j_4+j_5} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{Bmatrix}$$

が使われる.

2) たとえば $\begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} d & e & c \\ a & b & f \end{Bmatrix}$ の意である [訳注].

3) 第45図の4面体を4正面体にあらわすと, 量子数 j の24個の同等な交換は, 正4面体の24個の対称変換 (回転と鏡映) を行なった結果として得られる.

称性は量子数 j の別の組の記号間の同等性を確立するもので

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} j_1 & \frac{1}{2}(j_2+j_5+j_3-j_6) & \frac{1}{2}(j_3+j_6+j_2-j_5) \\ j_4 & \frac{1}{2}(j_2+j_5+j_6-j_3) & \frac{1}{2}(j_3+j_6+j_5-j_2) \end{Bmatrix} \qquad (108.3)$$

である (T. Regge, 1959)[1].

6j-記号と 3j-記号のあいだの有用な関係式を示そう；これは定義 (108.2) を使って得られる：

$$\sum_{m_4 m_5 m_6} (-1)^{j_4+j_5+j_6-m_4-m_5-m_6} \begin{pmatrix} j_1 & j_5 & j_6 \\ m_1 & -m_5 & m_6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_4 & j_2 & j_6 \\ m_4 & m_2 & -m_6 \end{pmatrix}$$
$$\times \begin{pmatrix} j_4 & j_5 & j_3 \\ -m_4 & m_5 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{Bmatrix}. \qquad (108.4)$$

この等式の左辺で加えあわせられる式は，(108.2) のなかの和と比べて因子 (3j - 記号) が一つ欠ける点が異なっている．したがって，(108.4) の和は，その面のなかの一つがない 4 面体 (第45図) として描かれるということができる；これによりその和はスカラーとは異なる．いいかえると，変換性に関してそれは一つの 3j-記号——等式 (108.4) の右辺にあるもの——に対応し，それに比例しなければならない．これに対し比例係数 (等式の右辺の 6j-記号) は，等式の両辺に $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ を掛け，残りの量子数 m_1, m_2, m_3 について加えて，容易に得ることができる．

三つの角運動量の合成に関する次のような問題を考察する際に，6j-記号が自然にあらわれてくる．

三つの角運動量 j_1, j_2, j_3 が角運動量 J に合成されるとしよう．しかしながら，角運動量 J (およびその投影 M) を与えても，系の状態はまだ一意的には定まらない；系の状態は角運動量の合成の方法 (あるいは，よくいわれるように，結合図式) にも依存する．

たとえば次のような二つの結合図式を考えよう：1) 始めに角運動量 j_1 と j_2 とが角運動量 j_{12} に合成され，それから j_{12} と j_3 が最終の角運動量 J に合成される；2) 角運動量 j_2 と j_3 が j_{23} に合成され，次に j_{23} と j_1 が J に合成される．始めの図式は，(j_1, j_2, j_3, J, M と並んで) j_{12} の大きさが一定値をもつ状態に対応

1) 527頁脚注参照．

する； この波動関数は$\psi_{j_{12}JM}$（簡単のために，くり返される添字j_1, j_2, j_3は省く）と書く．同様に，2番目の結合図式の波動関数は$\psi_{j_{23}JM}$と書く．両方の場合とも，《中間の》角運動量j_{12}あるいはj_{23}の値は一般に一つの値ではない．したがって（JとMが与えられたとき）われわれは，j_{12}あるいはj_{23}の値を異にする波動関数の二つの異なる組を得ることになる．一般則に従って，これらの2組の関数は互いに，あるユニタリ変換によって結ばれる：すなわち

$$\psi_{j_{23}JM}=\sum_{j_{12}}\langle j_{12}|j_{23}\rangle\psi_{j_{12}JM}. \tag{108.5}$$

物理的考察から，これらの変換係数が量子数Mに依存しないことは明らかである；すなわち，それは空間内での全系の方向によることはあり得ない．このようなわけで，それは6個の角運動量$j_1j_2j_3j_{12}j_{23}J$の値にのみ依存し，その投影の値にはよらない．すなわち，（上記の意味で）スカラー量である．これらの係数の実際の計算は，つぎのようにして容易に遂行される：

$$\begin{aligned}\psi_{j_{23}JM}&=\sum_{(m)}\langle m_1m_{23}|JM\rangle\psi_{j_1m_1}\psi_{j_{23}m_{23}}\\&=\sum_{(m)}\langle m_1m_{23}|JM\rangle\langle m_2m_3|j_{23}m_{23}\rangle\psi_{j_1m_1}\psi_{j_2m_2}\psi_{j_3m_3}\\\psi_{j_{12}JM}&=\sum_{(m)}\langle m_3m_{12}|JM\rangle\langle m_1m_2|j_{12}m_{12}\rangle\psi_{j_1m_1}\psi_{j_2m_2}\psi_{j_3m_3}\end{aligned}$$

（和の記号の下の記号(m)は，式中に現われる数$m_1, m_2, \cdots$の和をとることを意味する）．今度はψ_{jm}の規格直交性を使って

$$\begin{aligned}\langle j_{12}|j_{23}\rangle&\equiv\int\psi^*_{j_{12}JM}\psi_{j_{23}JM}dq\\&=\sum_{(m)}\langle m_2m_{12}|JM\rangle\langle m_1m_{23}|JM\rangle\langle m_1m_2|j_{12}m_{12}\rangle\langle m_2m_3|j_{23}m_{23}\rangle\end{aligned}$$

を得る． 等式の右辺の和は， 与えられたMの値について行なわれるが，和の結果は実際には（上記の理由で）Mには依存しない． したがって，和はMの値についてまで拡張し，その際，和の前に因子$1/(2J+1)$を置けばよい．その後で，(106.10) に従って係数$\langle m_1m_2|jm\rangle$を3j-記号であらわせば，その結果，次のような式を得る：

$$\langle j_{12}|j_{23}\rangle=(-1)^{j_1+j_2+j_3+J}\sqrt{(2j_{12}+1)(2j_{23}+1)}\begin{Bmatrix}j_1 & j_2 & j_{12}\\ j_3 & J & j_{23}\end{Bmatrix}. \tag{108.6}$$

6j-記号と変換（108.5）の係数との関係は，6j-記号の積の和に対する若干の有用な公式を得るのを容易にする．

まず第一に，変換（108.5）のユニタリ性（およびその係数が実数であること）のために，関係式

$$\sum_{j}(2j+1)(2j''+1)\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j' \\ j_3 & j_4 & j \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} j_3 & j_2 & j \\ j_1 & j_4 & j'' \end{Bmatrix}=\delta_{j'j''} \qquad (108.7)$$

が成立する．

さらに三つの角運動量の三つの結合図式を考えよう；その中間の和をそれぞれ j_{12}, j_{23} および j_{31} としよう．行列の掛算の規則に従い，対応する変換係数（108.6）は相互に関係式

$$\sum_{j_{23}}\langle j_{12}|j_{23}\rangle\langle j_{23}|j_{31}\rangle=\langle j_{12}|j_{31}\rangle$$

によって結ばれる．これに（108.6）を代入し，添字の書きかえを行なって

$$\sum_{j}(-1)^{j+j_3+j_6}(2j+1)\begin{Bmatrix} j_2 & j_4 & j_6 \\ j_1 & j_5 & j \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} j_4 & j_1 & j \\ j_2 & j_5 & j_3 \end{Bmatrix}=\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{Bmatrix} \qquad (108.8)$$

を得る．

最後に四つの角運動量の異なる結合図式を考えることにより，3個の $6j$-記号の積に対して次のような合成の公式を得る[1]：

$$\sum_{j}(-1)^{j+\sum_1^9 j_i}(2j+1)\begin{Bmatrix} j_4 & j_2 & j_6 \\ j_9 & j_8 & j \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ j_7 & j & j_9 \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} j_4 & j_3 & j_5 \\ j_7 & j_8 & j \end{Bmatrix}$$
$$=\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} j_6 & j_1 & j_5 \\ j_7 & j_8 & j_9 \end{Bmatrix} \qquad (108.9)$$

(L. C. Biedenharn, J. P. Elliott, 1953).

参考のために，$6j$-記号のあらわな式をいくつかあげよう．

$6j$-記号は一般の場合には次の和の形にあらわされる：

$$\begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{Bmatrix}=\Delta(j_1j_2j_3)\Delta(j_1j_5j_6)\Delta(j_4j_2j_6)\Delta(j_4j_5j_3)$$
$$\times\sum_{z}\left[\frac{(-1)^z(z+1)!}{(z-j_1-j_2-j_3)!(z-j_1-j_5-j_6)!(z-j_4-j_2-j_6)!(z-j_4-j_5-j_3)!}\right.$$
$$\left.\times\frac{1}{(j_1+j_2+j_4+j_5-z)!(j_2+j_3+j_5+j_6-z)!(j_3+j_1+j_6+j_4-z)!}\right], \qquad (108.10)$$

ここで

$$\Delta(abc)=\left[\frac{(a+b-c)!(a-b+c)!(-a+b+c)!}{(a+b+c+1)!}\right]^{1/2}$$

---

1)　第1巻252頁で引用したエドモンズの著書参照．

第10表 6j-記号に対する公式

$$\begin{Bmatrix} a & b & c \\ 0 & c & b \end{Bmatrix} = \frac{(-1)^s}{\sqrt{(2b+1)(2c+1)}}, \quad s=a+b+c$$

$$\begin{Bmatrix} a & b & c \\ \frac{1}{2} & c-\frac{1}{2} & b+\frac{1}{2} \end{Bmatrix} = (-1)^s \left[\frac{(s-2b)(s-2c+1)}{(2b+1)(2b+2)2c(2c+1)}\right]^{1/2}$$

$$\begin{Bmatrix} a & b & c \\ \frac{1}{2} & c-\frac{1}{2} & b-\frac{1}{2} \end{Bmatrix} = (-1)^s \left[\frac{(s+1)(s-2a)}{2b(2b+1)2c(2c+1)}\right]^{1/2}$$

$$\begin{Bmatrix} a & b & c \\ 1 & c-1 & b-1 \end{Bmatrix} = (-1)^s \left[\frac{s(s+1)(s-2a-1)(s-2a)}{(2b-1)2b(2b+1)(2c-1)2c(2c+1)}\right]^{1/2}$$

$$\begin{Bmatrix} a & b & c \\ 1 & c-1 & b \end{Bmatrix} = (-1)^s \left[\frac{2(s+1)(s-2a)(s-2b)(s-2c+1)}{2b(2b+1)(2b+2)(2c-1)2c(2c+1)}\right]^{1/2}$$

$$\begin{Bmatrix} a & b & c \\ 1 & c-1 & b+1 \end{Bmatrix} = (-1)^s \left[\frac{(s-2b-1)(s-2b)(s-2c+1)(s-2c+2)}{(2b+1)(2b+2)(2b+3)(2c-1)2c(2c+1)}\right]^{1/2}$$

$$\begin{Bmatrix} a & b & c \\ 1 & c & b \end{Bmatrix} = (-1)^{s+1} \frac{2[b(b+1)+c(c+1)-a(a+1)]}{[2b(2b+1)(2b+2)2c(2c+1)(2c+2)]^{1/2}}$$

であり，そして分母の階乗の引数が一つでも負にならないような z のあらゆる正の整数値について和をとるものとする．

第 10 表にはパラメーターのなかの一つが，0，1/2 または 1 に等しい場合の 6j-記号の公式が与えられている．

この節のまとめとして，3j-記号からつくられるより高次のスカラーについて二，三述べることにする．

6 個の 3j-記号の積の縮約によってつくられるスカラーは，複雑さの点で 6j-記号につぐものである．これらの 3j-記号は対ごとに一致する18個の量子数 j を含み，結果として生ずるスカラーは 9 個のパラメーター j に依存する．これはふつう **9j-記号**と呼ばれ，次のように定義される (E. Wigner, 1951)[1]：

$$\begin{Bmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ j_{31} & j_{32} & j_{33} \end{Bmatrix} = \sum_{\text{all } m} \begin{pmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ m_{11} & m_{12} & m_{13} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{31} & j_{32} & j_{33} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix}$$
$$\times \begin{pmatrix} j_{11} & j_{21} & j_{31} \\ m_{11} & m_{21} & m_{31} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{12} & j_{22} & j_{32} \\ m_{12} & m_{22} & m_{32} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{13} & j_{23} & j_{33} \\ m_{13} & m_{23} & m_{33} \end{pmatrix}. \quad (108.11)$$

1) 縮約 (108.1) の一般則に従えば，後の三つの 3j-記号では引数 m に負号をつけて書き，そして和の記号のなかに因子 $(-1)^{\Sigma(j-m)}$ を置く必要があると考えられよう．しかしながら，3j-記号の性質 (106.6) を使い，いまの場合容易にわかるように，合計 9 個の量子数 m の和 $\sum m$ はゼロに等しいことを考慮すれば，定義 (108.11) に到達する．

この量はまた3個の$6j$-記号の積の和の形にあらわすこともできる.

$$\begin{Bmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ j_{31} & j_{32} & j_{33} \end{Bmatrix} = \sum_j (-1)^{2j}(2j+1)\begin{Bmatrix} j_{11} & j_{21} & j_{31} \\ j_{32} & j_{33} & j \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} j_{12} & j_{22} & j_{32} \\ j_{21} & j & j_{23} \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} j_{13} & j_{23} & j_{33} \\ j & j_{11} & j_{12} \end{Bmatrix}. \quad (108.12)$$

(108.12) に定義 (108.2) を代入し，$3j$-記号の規格直交性を使えば，(108.11) と (108.12) が同値であることを容易に確かめることができる.

$9j$-記号は (108.11) の定義と$3j$-記号の対称性から直接でる高度の対称性をもっている. それの任意の二つの行，あるいは二つの列を交換すると，$9j$-記号には$(-1)^{\Sigma j}$が掛けられる. その他に$9j$-記号は転置に対し，すなわち行と列を互いに入れかえたときに不変である.

さらに高次のスカラーは，さらに多数のパラメーターjに依存する. これらの数がいつも3の倍数 ($3nj$-記号) でなければならないことは明らかである. われわれはここでこれらの量の性質を詳論するのはやめよう. ただどの$n>3$にも，1個以上の互いに移り合うことができない異なる型の$3nj$-記号があることだけに触れておこう. たとえば，$12j$-記号には二つの異なる型がある[1].

§ 109. 角運動量の合成に対する行列要素

ふたたび二つの部分(これらのことを部分系1および2ということにしよう) からなる系を考察し，$f_{kq}^{(1)}$をそれらのうちの1番目を特徴づける球面テンソルとしよう. この部分系の波動関数に関するこの球面テンソルの行列要素は，(107.6) に従って公式

$$\langle n_1' j_1' m_1' | f_{kq}^{(1)} | n_1 j_1 m_1 \rangle = i^k (-1)^{j_{1\,\max} - m_1'} \begin{pmatrix} j_1' & k & j_1 \\ -m_1' & q & m_1 \end{pmatrix} \langle n_1' j_1' \| f_k^{(1)} \| n_1 j_1 \rangle \quad (109.1)$$

によって与えられる. 系全体の波動関数に関するこの同じ量の行列要素の計算に関する問題が起こる；これが式 (109.1) にあらわれる同じ既約行列要素によってあらわされることを示そう.

1) $9j$-記号の理論の詳しい記述，および$3nj$-記号の性質については，第1巻252頁で引用したエドモンズの著書および，A. P. Yustis, I. B. Levinson, V. V. Vanagas, *Mathematical Apparatus of the theory of angular momentum*, Oldbourne Press, London, 1963 参照.

系全体の状態は量子数 $j_1 j_2 J M n_1 n_2$ で与えられる（J, M は全系の角運動量の大きさと投影である）．$f^{(1)}_{kq}$ は部分系 1 に関するものであるから，その演算子は部分系 2 の演算子と可換である．したがって，その行列は j_2 に関して対角的である；それはまた，その部分系の残りの量子数 n_2 に関しても対角的である．これらの添字 (j_2, n_2) を簡単のために落として，求める行列要素を

$$\langle n_1' j_1' J' M' | f^{(1)}_{kq} | n_1 j_1 J M \rangle$$

と書こう．(107.6) に従って，その量子数 M への依存性は公式

$$\langle n_1' j_1' J' M' | f^{(1)}_{kq} | n_1 j_1 J M \rangle = i^k (-1)^{J_{\max} - M'} \begin{pmatrix} J' & k & J \\ -M' & q & M \end{pmatrix} \langle n_1' j_1' J' \| f^{(1)}_k \| n_1 j_1 J \rangle \quad (109.2)$$

によって与えられる．

(109.1) と (109.2) の右辺の既約行列要素のあいだの関係式をたてるために，行列要素の定義から

$$\langle n_1' j_1' J' M' | f^{(1)}_{kq} | n_1 j_1 J M \rangle = \int \psi^*_{J'M'} \hat{f}^{(1)}_{kq} \psi_{JM} dq$$
$$= \sum_{m_1 m_1'} (-1)^{j_1' - j_1 + M' - M} \sqrt{(2J'+1)(2J+1)} \begin{pmatrix} j_1' & j_2 & J' \\ m_1' & m_2 & -M' \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} \langle n_1' j_1' m_1' | f^{(1)}_{kq} | n_1 j_1 m_1 \rangle$$

と書こう．これに (109.1) と (109.2) を代入し，得られた関係式を公式 (108.4) と比較すると，((109.1) と (109.2) のなかの) 既約行列要素の比はある $6j$-記号に比例する必要があることがわかる．上に述べた二つの関係式の綿密な比較から，次のような最終的な公式が導かれる：

$$\langle n_1' j_1' J' \| f^{(1)}_k \| n_1 j_1 J \rangle = (-1)^{j_{1\max} + j_2 + J_{\min} + k} \sqrt{(2J+1)(2J'+1)} \begin{Bmatrix} j_1' & J' & j_2 \\ J & j_1 & k \end{Bmatrix} \langle n_1' j_1' \| f^{(1)}_k \| n_1 j_1 \rangle \quad (109.3)$$

（ここで $j_{1\max}$ は j_1, j_1' のうちの大きい方，$J_{\min}$ は J, J' のうちの小さい方である）．2 番目の部分系に関する球面テンソルの既約行列要素に対する同様な公式は

$$\langle n_2' j_2' J' \| f^{(2)}_k \| n_2 j_2 J \rangle = (-1)^{j_1 + j_{2\min} + J_{\max} + k} \sqrt{(2J+1)(2J'+1)} \begin{Bmatrix} j_2' & J' & j_1 \\ J & j_2 & k \end{Bmatrix} \langle n_2' j_2' \| f^{(2)}_k \| n_2 j_2 \rangle \quad (109.4)$$

である．式 (109.3) と (109.4) とを比べて，(-1 のベキ指数のなかの) 完全な対称性が欠如していることは，波動関数の位相が角運動量の合成の順序に依存することと関係がある．もしも二つの部分系に対して同時に行列要素を計算することになると，この差を考慮しなければならない．

さらに，異なる部分系に関する（したがって互いに可換な）同じ k 階の二つの球面テンソルのスカラー積（定義 (107.4) 参照）の，全系の波動関数に関する行列要素に対する有用な公式を求めよう．(107.10) に従って，これらの行列要素は，各テンソルの（全系の波動関数に関する）既約行列要素によって次のようにあらわされる：

$$\langle n_1'n_2'j_1'j_2'JM|(f_k^{(1)}f_k^{(2)})_{00}|n_1n_2j_1j_2JM\rangle$$
$$=\frac{1}{2J+1}\sum_{J''}\langle n_1'j_1'J\|f_k^{(1)}\|n_1j_1J''\rangle\langle n_2'j_2'J''\|f_k^{(2)}\|n_2j_2J\rangle$$

（ここで，部分系の一方に関する量の行列は，他の部分系の量子数について対角的であることが用いられた）．これに (109.3)，(109.4) を代入し，和の公式 (108.8) を用いると，求める公式を得る：

$$\langle n_1'n_2'j_1'j_2'JM|(f_k^{(1)}f_k^{(2)})_{00}|n_1n_2j_1j_2JM\rangle$$
$$=(-1)^{j_{1\,\min}+j_{2\,\max}+J}\begin{Bmatrix}J & j_2' & j_1'\\ k & j_1 & j_2\end{Bmatrix}\langle n_1'j_1'\|f_k^{(1)}\|n_1j_1\rangle\langle n_2'j_2'\|f_k^{(2)}\|n_2j_2\rangle. \tag{109.5}$$

これはスカラー積の行列要素を，対応する部分系の波動関数に関する各テンソルの既約行列要素を使ってあらわしている．

§ 110. 軸対称系に対する行列要素

三つの D-関数の積の積分式は，対称こまの型の系を特徴づける行列要素の計算の基礎になる量である．

この公式を導くために展開 (106.11) に戻ろう：

$$\psi_{j_1m_1}\psi_{j_2m_2}=\sum_j\langle jm|m_1m_2\rangle\psi_{jm},\qquad m=m_1+m_2.$$

等式の両辺を座標系の有限の回転により変換する．ψ-関数はいずれも (58.7) に従って変換される．したがって

$$\sum_{m_1'm_2'}D^{(j_1)}_{m_1'm_1}D^{(j_2)}_{m_2'm_2}\psi_{j_1m_1'}\psi_{j_2m_2'}=\sum_j\sum_{m'}\langle jm|m_1m_2\rangle D^{(j)}_{m'm}\psi_{jm'}$$

を得る．ここで等式の右辺の関数 $\psi_{jm'}$ を展開（106.9）の形にあらわして，同じ積 $\psi_{j_1m_1}\psi_{j_2m_2}$ の係数を等しいとおくと関係式

$$D^{(j_1)}_{m_1'm_1}(\omega)D^{(j_2)}_{m_2'm_2}(\omega)=\sum_j \langle m_1'm_2'|jm\rangle D^{(j)}_{m'm}(\omega)\langle m_1m_2|jm\rangle \quad (110.1)$$

を得る（ここで $m=m_1+m_2$，$m'=m_1'+m_2'$ で ω は三つのオイラー角 α, β, γ をひとまとめにしたものをあらわす）．3j-記号を使ってあらわすと，この式は

$$D^{(j_1)}_{m_1'm_1}(\omega)D^{(j_2)}_{m_2'm_2}(\omega)=\sum_j (2j+1)\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1' & m_2' & -m' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix}D^{(j)*}_{-m',-m}(\omega) \quad (110.2)$$

の形になる（ここでまた D-関数の性質（58.19）が使われた）．

等式（110.2）の両辺に $D^{(j)}_{-m',-m}(\omega)$ を掛けて $d\omega$ について積分し，直交性（58.20）を使って

$$\int D^{(j_1)}_{m_1'm_1}(\omega)D^{(j_2)}_{m_2'm_2}(\omega)D^{(j_3)}_{m_3'm_3}(\omega)\frac{d\omega}{8\pi^2}=\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1' & m_2' & m_3' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \quad (110.3)$$

を得る（対称性をよくするために，ここで添字の自明な変更が行なわれた）．これが求める公式である[1]．

$f_{kq'}$ を，こまに固定した座標軸 $x'y'z'\equiv\xi\eta\zeta$（軸 ζ はこまの軸方向）におけるこまの特性をあらわす球面テンソルとする．これは例えば電気的あるいは磁気的多重極モーメントであってもよい．f_{kq} を静止した座標軸 xyz についての同じテンソルとする．これら相互間の関係は有限回転の行列により

$$f_{kq}=\sum_{q'} D^{(k)}_{q'q}(\omega)f_{kq'} \quad (110.4)$$

で定義される．

系全体の回転を記述する波動関数は，D-関数と規格化定数だけが違っている．すなわち

$$\psi_{jm\mu}=i^j\sqrt{\frac{2j+1}{8\pi^2}}D^{(j)}_{\mu m}(\omega). \quad (110.5)$$

ここで j は全角運動量，m は静止した z 軸へのその投影で，μ は系の軸へのその投影である．位相因子は整数の j と $\mu=0$ のときに，関数（110.5）が自由な角運動量の固有関数（(103.8) 参照）に移るように選ばれた．これらの関数に

1）整数値 $j_1=l_1$，$j_2=l_2$，$j_3=l_3$ および $m_1'=m_2'=m_3'=0$ のとき関数 $D^{(l)}_{0m}$ は（58.25）に従って球関数になり，公式（110.3）は三つの球関数の積の積分に対する式（107.14）を与える．

よって量 (110.4) の行列要素を公式 (110.3) を使って計算し（このとき D-関数の複素共役は (58.19) によってあらわされる），

$$\langle j'\mu'm'|f_{kq}|j\mu m\rangle$$
$$=i^{j-j'}(-1)^{\mu'-m'}\sqrt{(2j+1)(2j'+1)}\begin{pmatrix} j' & k & j \\ -\mu' & q' & \mu \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j' & k & j \\ -m' & q & m \end{pmatrix}\langle\mu'|f_{kq'}|\mu^*\rangle \tag{110.6}$$

を得る（ここで $q'=\mu'-\mu$, $q=m'-m$).

この公式は提起された問題の解になっている．これは行列要素の角運動量 j, j' およびその投影 m, m' への依存性を決定する． しかし量子数 μ, μ' への依存性に関しては，もちろん決定できないままである．これらの量子数の値は系の《内部》状態に依存する．その内部状態の間で《内部》行列要素 $\langle\mu'|f_{kq'}|\mu\rangle$ がとられる．

行列要素 (110.6) の量子数 m, m' への依存性は，もちろん与えられた全角運動量を持つすべての系に対して同様である．この依存性を，(107.6) に従って既約行列要素を導入することによって分離して，後者に対して次式を得る：

$$\langle j'\mu'\|f_k\|j\mu\rangle$$
$$=i^{j-j'-k}(-1)^{j_{\max}-\mu'}\sqrt{(2j+1)(2j'+1)}\begin{pmatrix} j' & k & j \\ -\mu' & q' & \mu \end{pmatrix}\langle\mu'|f_{kq'}|\mu\rangle. \tag{110.7}$$

行列要素 (110.6) の絶対値の自乗を与えられた m に対し終りの量子数 m' (および $q=m'-m$)について加えたものは，m の値には依存せず，一般則(107.11) に従って次式に等しい：

$$\sum_{qm'}|\langle j'\mu'm'|f_{kq}|j\mu m\rangle|^2=\frac{1}{2j+1}|\langle j'\mu'\|f_k\|j\mu\rangle|^2$$
$$=(2j'+1)\begin{pmatrix} j' & k & j \\ -\mu' & q' & \mu \end{pmatrix}^2|\langle\mu'|f_{kq'}|\mu\rangle|^2. \tag{110.8}$$

座標 xyz での既約行列要素 (110.7) に対するエルミート性の関係式 (107.9) は，当然のことながら，座標 $\xi\eta\zeta$ での行列要素に対する関係式 (107.8) すなわち

$$\langle\mu'|f_{kq'}|\mu\rangle=(-1)^{k-q}\langle\mu|f_{k,-q'}|\mu\rangle^*$$

と一致する．

このような軸対称の系の回転は，2原子分子(あるいは軸対称核)と同様に，系の軸の方向を決定する合計二つの角 ($\alpha\equiv\varphi$, $\beta\equiv\theta$) によって記述される．こ

の場合の回転波動関数は（110.5）と因子 $e^{i\mu\nu}/\sqrt{2\pi}$ がない点が異なっている(389頁脚注参照)．しかしながら，この変更は行列要素には反映しない．関数 $D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$ の γ 依存性は結局因子 $e^{im'\gamma}$ になるので，式（110.3）は次の形に書き換えられる：

$$\delta_{m'0}\int D^{(j_1)}_{m_1'm_1}(\alpha,\beta,0)D^{(j_2)}_{m_2'm_2}(\alpha,\beta,0)D^{(j_3)}_{m_3'm_3}(\alpha,\beta,0)\frac{\sin\alpha d\alpha d\beta}{4\pi}$$
$$=\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1' & m_2' & m_3' \end{pmatrix}$$

（ここで $m'=m_1'+m_2'+m_3'$）となり，積分の計算結果は不変である．このとき角運動量の系の軸への投影についての選択則は，従前通り成り立つ（$\mu'-\mu=q'$）．これは（ζ 軸についての分子の対称性の結果として）電子波動関数の直交性から生じている．式（110.6），（110.7）中で $\langle\mu'|f_{kq'}|\mu\rangle$ はここでは核が動かないとしたときの電子状態についての行列要素と考えねばならない．

第15章　磁場の中の運動

§ 111. 磁場の中のシュレーディンガー方程式

スピンをもつ粒子は確定した《固有の》磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}$ をもっている．それに対応する量子力学的演算子はスピン演算子 $\hat{\boldsymbol{s}}$ に平行である．すなわち

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}=\frac{\mu}{s}\hat{\boldsymbol{s}} \tag{111.1}$$

と書ける．ここで s は粒子のスピンの値で，μ は粒子に対して特徴的な定数である．磁気モーメントの投影の固有値は $\mu_z=\mu\sigma/s$ である．このことから，（ふつう単に磁気モーメントの値と呼ばれる）係数 μ は，スピンの投影が $\sigma=s$ に達したときの μ_z の可能な最大値であらわされることは明らかである．

比 $\mu/\hbar s$ は，粒子の固有の磁気モーメントと粒子の固有の力学的角運動量との比を与えている（ただし両方が z 軸を向いているとしている）．よく知られているように，ふつうの（軌道）角運動量に対してこの比は $e/2mc$ である（第Ⅱ巻『場の古典論』§44参照）．ところが粒子の固有磁気モーメントとスピンとの間の比例係数はそれとは異なる．電子に対してそれは $-|e|/mc$，つまりふつうの値の2倍の大きさである（このような値は理論的にディラックの相対論的波動方程式から求められる．第Ⅳ巻『相対論的量子力学』§33参照）．したがって（スピン1/2の）電子の固有磁気モーメントは $-\mu_B$ であり，ここで

$$\mu_B=\frac{|e|\hbar}{2mc}=0.927\times10^{-20}\ \text{erg/gauss} \tag{111.2}$$

である．この量は**ボーア磁子**と呼ばれる．

重い核子の磁気モーメントは $e\hbar/2m_pc$ と定義される**核磁子**で測られるのがふつうである（ここで m_p は陽子の質量である）．実験によれば陽子の固有磁気モーメントの値は2.79核磁子であり，磁気モーメントはスピンに平行である．中性子の磁気モーメントはスピンに反平行であり，1.91核磁子である．

ここで等式（111.1）の両辺にある量 $\boldsymbol{\mu}$ と $\boldsymbol{s}$ は当然のことながらベクトルとして同じ性質をもつことに注意しよう．つまり両者は軸性ベクトルである．電気双極モーメント $\boldsymbol{d}$ に対する同様の等式（$\boldsymbol{d}=\mathrm{const}\cdot\boldsymbol{s}$）は，座標の反転に関する対称性と矛盾する．つまり反転によって等式[1]の両辺の相対的な符号が変わるからである．

非相対論的理論では磁場は外場としてしかみなされない．粒子どうしの磁気的相互作用は相対論的効果であり，それを考慮するには首尾一貫した相対論的理論が必要となる．

古典理論において電磁場中の荷電粒子のハミルトン関数はつぎの形をもつ：

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+e\varphi.$$

ここで φ は場のスカラー・ポテンシャル，$\boldsymbol{A}$ はベクトル・ポテンシャル，$\boldsymbol{p}$ は粒子の一般化運動量である（第II巻『場の古典論』§16参照）．もしも粒子がスピンをもたないとすると，量子力学への移行は，ふつうのとおりに行なうことができる：一般化運動量は演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}=-i\hbar\nabla$ に置き換えられ，ハミルトニアン

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+e\varphi \tag{111.3}$$

が得られる[2]．

ところがもしも粒子がスピンをもつとすると，このような操作は不十分となる．そのわけは，粒子の固有磁気モーメントは磁場と直接相互作用を行なうからである．古典的なハミルトン関数ではこの相互作用は一般に存在しない．それは，スピン自身は純粋に量子的効果であるので，古典的極限への移行に対して消滅するからである．粒子のハミルトニアンに対する正しい表式は，磁場 $\boldsymbol{H}$ の中の磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}$ のエネルギーに対応する付加項 $-\hat{\boldsymbol{\mu}}\boldsymbol{H}$ を式（111.3）に加えることにより得られる．したがってスピンをもち，磁場の中にある粒子

1）この等式（としたがって素粒子に電気双極子モーメントが存在すること）は時間反転に関する対称性と矛盾することに注目しよう．時間の符号を変えると $\boldsymbol{d}$ は変わらないが，スピンの符号は変わる（このことは例えば，軌道運動におけるこれらの量の定義から明らかである．$\boldsymbol{d}$ の定義は座標しか含まないが，角運動量の定義には粒子の速度も含まれる）．

2）ここでは一般化運動量を，それに同じ演算子が対応していることを強調するために（第II巻『場の古典論』§16の $\boldsymbol{P}$ でなく）ふつうの運動量と同じ記号 $\boldsymbol{p}$ であらわすことにする．

のハミルトニアンは次の形をもつ[1]：

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-\hat{\boldsymbol{\mu}}\boldsymbol{H}+e\varphi. \qquad (111.4)$$

自乗式 $\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2$ の展開に際して，一般的にいって，演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}$ は座標の関数であるベクトル $\boldsymbol{A}$ と可換でないことを考慮しなければならない．したがって，次のように書かなければならない：

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2-\frac{e}{2mc}(\hat{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{p}})+\frac{e^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2-\frac{\mu}{s}\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{H}+e\varphi. \qquad (111.5)$$

運動量演算子と任意の座標関数との交換則 (16.4) によれば

$$\hat{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{p}}=-i\hbar\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{A} \qquad (111.6)$$

である．したがってもしも $\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}=0$ ならば，$\hat{\boldsymbol{p}}$ と $\boldsymbol{A}$ は可換である．これは，たとえば一様な磁場に対して，ベクトル・ポテンシャルを

$$\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}[\boldsymbol{H}\boldsymbol{r}] \qquad (111.7)$$

の形に選べば満たされている．

ハミルトニアン (111.4) をもつ方程式 $i\hbar\partial\Psi/\partial t=\hat{H}\Psi$ は，磁場が存在する場合のシュレーディンガー方程式の一般化をあらわしている．この方程式でハミルトニアンが作用する波動関数は $2s$ 階の対称スピノールである．

電磁場の中の粒子の波動関数は一義的に定まらない．それは，場のポテンシャルの選び方が一義的でないからである．よく知られているように（第II巻『場の古典論』§18 参照)，場のポテンシャルは次の**ゲージ変換**の範囲までしか決定されない：

$$\boldsymbol{A}\ \rightarrow\ \boldsymbol{A}+\nabla f, \qquad \varphi\ \rightarrow\ \varphi-\frac{1}{c}\frac{\partial f}{\partial t}. \qquad (111.8)$$

ここで f は時間および座標の任意の関数である．このような変換を行なっても磁場の値は変わらない．したがって，この変換は波動方程式の解を本質的に変えることができないことは明らかである；たとえば自乗 $|\Psi|^2$ は変わらないままでなければならない．実際に，ハミルトニアンで置換 (111.8) と同時に波動関数の置換

---

1) 磁場とハミルトニアンが同じ文字であらわされていることで混同してはならない．ハミルトニアンの上にはいつも山印がある．

$$\Psi \rightarrow \Psi \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} f\right) \tag{111.9}$$

を行なえば，最初の方程式に戻ることが容易にわかる．波動関数のこの非一義性は，物理的意味をもついかなる量にもあらわれない（このような量の定義においてポテンシャルは，あらわにはあらわれない）．

古典力学では粒子の一般化運動量は，その速度と関係式 $m\boldsymbol{v}=\boldsymbol{p}-e\boldsymbol{A}/c$ により結ばれている．量子力学における演算子 $\hat{\boldsymbol{v}}$ を見いだすためには，ベクトル $\boldsymbol{r}$ とハミルトニアンとの交換子をとらなければならない．簡単な計算の結果

$$m\hat{\boldsymbol{v}}=\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A} \tag{111.10}$$

となり，これは古典的表式とまったく同じである．速度成分演算子に対しては次の交換則が成り立つ：

$$\begin{aligned} \{\hat{v}_x, \hat{v}_y\} &= i\frac{e\hbar}{m^2c}H_z, \\ \{\hat{v}_y, \hat{v}_z\} &= i\frac{e\hbar}{m^2c}H_x, \\ \{\hat{v}_z, \hat{v}_x\} &= i\frac{e\hbar}{m^2c}H_y. \end{aligned} \tag{111.11}$$

これは直接の計算により容易に証明される．磁場の中では（荷電)粒子の速度の 3 成分の演算子は互いに可換でないことがわかる．このことは，粒子が三つの方向すべてについて速度の確定値を同時にもつことができないことを意味している．

磁場の中の運動に対して，磁場 $\boldsymbol{H}$（およびベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}$）の符号を変える条件に対してのみ時間反転に関する対称性が成り立つ．このことは，複素共役値をとり，$\boldsymbol{H}$ の符号を変える変換に対してシュレーディンガー方程式 $\hat{H}\psi=E\psi$ がそれ自身の形を保たなければならないことを意味している（§18 および §60 参照）．ハミルトニアン (111.4) の中の項 $-\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{H}$ を除くあらゆる項に対して，このことはただちに明らかである．ところがシュレーディンガー方程式の中の $-\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{H}\psi$ の項は考えている変換によって $\hat{\boldsymbol{s}}^*\boldsymbol{H}\psi^*$ に変わり，一見したところ要求している不変性が破られているようである．そのわけは演算子 $\hat{\boldsymbol{s}}^*$ は $-\hat{\boldsymbol{s}}$ と同じでないからである．しかしながら，波動関数は実際にはスピノール $\psi^{\lambda\mu\cdots}$ であり，時間反転に対して反変スピノールは共変スピノールに変わ

らなければならず（§ 60 参照），したがってシュレーディンガー方程式の中の $-\hat{s}H\psi^{\lambda\mu\cdots}$ の項は $\hat{s}^*H\psi_{\lambda\mu\cdots}$ に変わるということを考慮しなければならない．（定義（57.4），（57.5）を用いると）演算子 $\hat{s}^*$ を共変スピノール成分に作用させた結果は，演算子 $\hat{s}$ を反変スピノール成分に作用させた結果と符号だけが異なっているということが容易にわかる．その結果時間反転の演算子は，成分 $\psi_{\lambda\mu\cdots}$ に対するシュレーディンガー方程式を，成分 $\psi^{\lambda\mu\cdots}$ に対する最初の方程式と同じ形のものにする．

§ 112. 一様な磁場の中の運動

定まった一様な磁場の中の粒子のエネルギー準位を決定しよう（エリ・デ・ランダウ Л. Д. Ландау, 1930）．ここでは一様な場のベクトル・ポテンシャルを（111.7）の形ではなく，次の形に選ぶと便利である：

$$A_x=-Hy, \qquad A_y=A_z=0 \tag{112.1}$$

（z 軸は場の方向に選んだ）．

ハミルトニアンは次の形になる：

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x+\frac{eH}{c}y\right)^2+\frac{\hat{p}_y^2}{2m}+\frac{\hat{p}_z^2}{2m}-\frac{\mu}{s}\hat{s}_zH. \tag{112.2}$$

まず最初に，演算子 $\hat{s}_z$ はハミルトニアンと可換であることに気がつく（なぜならば，ハミルトニアンはスピンの他の成分の演算子を含まないからである）．このことはスピンの z 成分が保存されること，したがって $\hat{s}_z$ は固有値 $s_z=\sigma$ に置換されることを意味している．したがって波動関数のスピン依存性は重要でなくなり，シュレーディンガー方程式の中の ψ はふつうの座標関数とみなすことができる．この関数に対しては次の方程式を得る：

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\hat{p}_x+\frac{eH}{c}y\right)^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2\right]\psi-\frac{\mu}{s}\sigma H\psi=E\psi. \tag{112.3}$$

この方程式のハミルトニアンは座標 x および z をあらわには含まない．したがって演算子 $\hat{p}_x$ および $\hat{p}_z$（x および z に関する微分）はハミルトニアンと可換である．すなわち一般化運動量の x および z 成分は保存される．したがって ψ を

$$\psi=e^{i(p_xx+p_zz)/\hbar}\chi(y) \tag{112.4}$$

の形に求めることにしよう．

固有値 p_x および p_z は $-\infty$ から $+\infty$ までのあらゆる値をとる． $A_z=0$ であるので一般化運動量の z 成分はふつうの運動量の成分 mv_z と一致する．したがって場の方向の粒子の速度は任意の値をとることができる；すなわち z 軸方向の運動は《量子化されない》ということができる．

(112.4) を (112.3) に代入すると，関数 $\chi(y)$ に対する次の方程式が得られる：

$$\chi''+\frac{2m}{\hbar^2}\left[\left(E+\frac{\mu\sigma}{s}H-\frac{p_z^2}{2m}\right)-\frac{m}{2}\omega_H^2(y-y_0)^2\right]\chi=0. \qquad (112.5)$$

ここで記号 $y_0=-cp_x/eH$ および

$$\omega_H=\frac{|e|H}{mc} \qquad (112.6)$$

を用いた．方程式 (112.5) は，振動数 $\omega=\omega_H$ で振動している1次元振動子に対するシュレーディンガー方程式 (23.6) と形式的に一致する．したがって，振動子のエネルギーの役割を果たす (112.5) の中の丸い括弧でくくった式は値 $(n+1/2)\hbar\omega_H$ をとることができるとただちに結論できる．ここで $n=0, 1, 2, \cdots$ である．

したがって，一様な磁場の中の粒子のエネルギー準位に対して次の式が得られる：

$$E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_H+\frac{p_z^2}{2m}-\frac{\mu\sigma}{s}H. \qquad (112.7)$$

この式の第1項はエネルギーの離散的な値を与え，場に垂直な平面内の運動に対応する．それは**ランダウ準位**と呼ばれる．電子に対しては $\mu/s=-|e|\hbar/mc$ であるので，式 (112.7) は次の形をもつ：

$$E=\left(n+\frac{1}{2}+\sigma\right)\hbar\omega_H+\frac{p_z^2}{2m}. \qquad (112.8)$$

エネルギー準位 (112.7) に対応する固有関数 $\chi_n(y)$ に適当な置換を行なって

$$\chi_n(y)=\frac{1}{\pi^{1/4}a_H^{1/2}\sqrt{2^n n!}}\exp\left\{-\frac{(y-y_0)^2}{2a_H^2}\right\}H_n\left(\frac{y-y_0}{a_H}\right) \qquad (112.9)$$

となる．ここで $a_H=\sqrt{\hbar/m\omega_H}$ である．

古典力学では場 $\boldsymbol{H}$ に垂直な平面 (xy 平面) 内の粒子の運動は静止中心をも

つ円周上の運動である．量子論的な場合に保存される量 y_0 は円の中心の古典的 y 座標に対応する．それとともに量 $x_0=(cp_y/eH)+x$ もまた保存される（容易にわかるように，この演算子はハミルトニアン (112.2) と可換である)．この量は円の中心の古典的 x 座標に対応する[1]．しかしながら，演算子 $\hat{x}_0$ および $\hat{y}_0$ は互いに可換でないので，座標 x_0 および y_0 は同時に確定値をもつことができない．

(112.7) は連続的な値をとる量 p_x を含まないので，エネルギー準位は連続的な多重度をもって縮退している．しかしながら，もしも x, y 面での運動が大きいがしかし有限の面積 $S=L_xL_y$ に限られているならば，縮退の多重度は有限になる．間隔 Δp_x の中の p_x の（いまや離散的な）異なる値の数は $(L_x/2\pi\hbar)\Delta p_x$ である．軌道の中心が S の中にあるような p_x のあらゆる値が許される（軌道の半径は大きい L_y にくらべて無視できる)．条件 $0<y_0<L_y$ から，$\Delta p_x=eHL_y/c$ が得られる．したがって（与えられた n および p_z に対する）状態の数は $eHS/2\pi\hbar c$ である．もしも運動の範囲が（幅 L_z の）z 軸方向に沿っても限られているならば，間隔 Δp_z の中の p_z の可能な値の数は $(L_z/2\pi\hbar)\Delta p_z$ であり，この間隔の中の状態の数は

$$\frac{eHS}{2\pi\hbar c}\frac{L_z}{2\pi\hbar}\Delta p_z=\frac{eHV}{4\pi^2\hbar^2 c}\Delta p_z \tag{112.10}$$

である．

電子に対してはなお付加的な縮退がある．エネルギー準位 (112.8) は量子数 n, $\sigma=1/2$ および $n+1$, $\sigma=-1/2$ をもつ状態に対して同じである．

問　題

1. 一様な磁場の中にあり，運動量および磁場の方向に沿っての角運動量の確定値をもつ状態にある粒子の波動関数を求めよ．

解　磁場の方向に沿って z 軸をもつ円柱座標 ρ, φ, z において，ベクトル・ポテンシャ

1) 実際に，半径 cmv_t/eH の円周上の古典的運動に対して（v_t は x, y 面への速度の投影．第 II 巻『場の古典論』§ 21 参照)，次式を得る：

$$y_0=-cp_x/eH=-(cm/eH)v_x+y.$$

この式から明らかなように，y_0 は円の中心の座標である．他の座標は，次のようになる：

$$x_0=(cm/eH)v_y+x=cp_y/eH+x.$$

ルは成分 $A_\varphi=H\rho/2$，$A_z=A_\rho=0$ をもち，シュレーディンガー方程式は[1]

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial\psi}{\partial\rho}\right)+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right]-\frac{i\hbar\omega_H}{2}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}+\frac{M\omega_H^2}{8}\rho^2\psi=E\psi \quad (1)$$

となる．これの解を

$$\psi=\frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}e^{ip_z z/\hbar}R(\rho)$$

の形に求めると，動径関数に対しては方程式

$$\frac{\hbar^2}{2M}\left(R''+\frac{1}{\rho}R'-\frac{m^2}{\rho^2}R\right)+\left[E-\frac{p_z^2}{2M}-\frac{M\omega_H^2}{8}\rho^2-\frac{\hbar\omega_H m}{2}\right]R=0$$

を得る．新しい独立変数 $\xi=(M\omega_H/2\hbar)\rho^2$ を導入すると，この方程式は次の形に書ける：

$$\xi R''+R'+\left(-\frac{\xi}{4}+\beta-\frac{m^2}{4\xi}\right)R=0, \qquad \beta=\frac{1}{\hbar\omega_H}\left(E-\frac{p_z^2}{2M}\right)-\frac{m}{2}.$$

$\xi\to\infty$ に対して求めている関数は $e^{-\xi/2}$ のように振舞い，$\xi\to 0$ に対しては $\xi^{|m|/2}$ のように振舞う．したがって解はこの形に求められる：

$$R(\xi)=e^{-\xi/2}\xi^{|m|/2}w(\xi).$$

ここで $w(\xi)$ に対しては合流型超幾何関数の方程式が得られる：

$$w=F\left\{-\left(\beta-\frac{|m|+1}{2}\right),\ |m|+1,\ \xi\right\}.$$

波動関数がいたるところで有限であるためには，量 $\beta-(|m|+1)/2$ が負でない整数 n_ρ でなければならない．これに対してエネルギー準位は式

$$E=\hbar\omega_H\left(n_\rho+\frac{|m|+m-1}{2}\right)+\frac{p_z^2}{2M}$$

で与えられ，これは式 (112.7) と同等である．この準位に対応する動径波動関数は

$$R_{n_\rho m}(\rho)=\frac{1}{a_H^{1+|m|}}\left[\frac{(|m|+n_\rho)!}{2^{|m|}n_\rho!(|m|!)^2}\right]^{1/2}\exp\left(-\frac{\rho^2}{4a_H^2}\right)\rho^{|m|}F\left(-n_\rho,\ |m|+1,\ \frac{\rho^2}{4a_H^2}\right) \quad (2)$$

である．ここで $a_H=\sqrt{\hbar/M\omega_H}$．関数は条件 $\int_0^\infty R^2\rho d\rho=1$ によって規格化されている．超幾何関数はここでは一般化ラゲール多項式となる．

2.　浅いポテンシャルの井戸 $U(r)$ ($|U|\ll\hbar^2/ma^2$，a は井戸の中で力のはたらく距離) の中にあって，それに一様な磁場が重なっているときの，電子の束縛状態に対応する最低エネルギー準位を求めよ (ユ・ア・ブィチコフ Ю. А. Бычков, 1960).

解　場 $U(r)$ に対して課せられた条件により (磁場が存在しないときは)，電子に摂動論を適用することができる．この場合には井戸に束縛状態が存在しない (§45)．磁場も存在する場合には場 $U(r)$ は，$\boldsymbol{H}$ に垂直な平面内の運動に対してのみ摂動とみなすことができる．その場合エネルギー・スペクトルの (離散的な) 性質は変わらない．ところが $\boldsymbol{H}$ の方向の運動の性質は変わる．(以下に見るように) 有界でない運動から有界運動となり，連続スペクトルから離散スペクトルとなる．したがってこの運動に対して井戸の場

1)　粒子の電荷は $e=-|e|$ と書き，粒子の質量は角運動量 m と区別するために M と書くことにする．この問題で粒子のスピンの項は重要でないので無視する．

は摂動としてあつかうことができない.

このことに対応して，シュレーディンガー方程式（前問の方程式 (1) の左辺に項 $U\psi$ を付加する）で変数分離を行なうとき，動経関数 $R(\rho)$ はすでに求めた (2) の形にとる．このとき最低準位には量子数の値 $n_\rho=m=0$ が対応する．シュレーディンガー方程式に $\psi=R_{00}(\rho)\chi(z)$ を代入し，その後で $R_{00}(\rho)$ を方程式に掛け，それを $\rho d\rho$ で積分すれば，$\chi(z)$ に対する方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\chi''+\overline{U}(z)\chi=\varepsilon\chi \tag{3}$$

を得る．ここで $\varepsilon=E-\hbar\omega_H/2$,

$$\overline{U}(z)=\int_0^\infty U(\sqrt{z^2+\rho^2})R_{00}^2(\rho)\rho d\rho$$

(m はここでも粒子の質量）である．この方程式は形式的に，ポテンシャルの井戸 $\overline{U}(z)$ の中の1次元運動に対するシュレーディンガー方程式と一致し，そして ε はこの運動のエネルギーである．このために，§45 の問1の結果をそのまま使うことができて，それによるとエネルギーの離散的準位は

$$\varepsilon=-\frac{m}{2\hbar^2}\left[\int_{-\infty}^\infty \overline{U}(z)dz\right]^2=-\frac{m}{2\hbar^2}\left[\int_{-\infty}^\infty\int_0^\infty U(\sqrt{z^2+\rho^2})R_{00}^2(\rho)\rho d\rho dz\right]^2. \tag{4}$$

波動関数 $R_{00}(\rho)$ は $\rho\sim a_H$ の距離で減衰する．もしも磁場が十分小さくて $a_H\gg a$ であるならば，ρ に関する積分は $\rho\lesssim a$ の範囲で決定されて，その範囲では $R_{00}(\rho)\approx R_{00}(0)=1/a_H$ と置くことができる．すると

$$\varepsilon=-\frac{me^2H^2}{8\pi^2\hbar^4c^2}\left(\int U(r)dV\right)^2 \tag{5}$$

($dV=2\pi\rho d\rho dz\to4\pi r^2dr$) となる．逆に $a_H\ll a$ となる強い磁場の場合には，(4) の積分は $\rho\lesssim a_H$ の範囲で決定されて，その範囲では $U(\sqrt{\rho^2+z^2})\approx U(z)$ と置くことができる．すると ρ に関する積分は関数 R_{00} の規格化積分に帰着され，1となる．それゆえ

$$\varepsilon=-\frac{2m}{\hbar^2}\left(\int_0^\infty U(z)dz\right)^2. \tag{6}$$

どちらの場合にも積分を評価すると，$\varepsilon\ll\hbar\omega_H$ となることがわかる．

3. $a_H\ll a_B$（ここで a_B はボーア半径）が成り立つほど十分強い磁場中の水素原子のエネルギー準位を決定せよ (R. J. Elliott, R. Loudon, 1960).

解　与えられた条件 $\hbar\omega_H\gg me^4/\hbar^2$ においては，核のクーロン場が，$\boldsymbol{H}$ に垂直な平面内での電子の運動におよぼす影響は小さい摂動とみなすことができる．したがって問2で考察した状況に戻り，式 (3) を適用することができて，

$$\overline{U}(z)=-e^2\int_0^\infty\frac{R_{00}^2(\rho)\rho}{\sqrt{\rho^2+z^2}}d\rho \tag{7}$$

を得る．この式で動径関数 R_{00} を書くにあたっては，以下では横運動がゼロのランダウ準位 ($\hbar\omega_H/2$) に関連した縦運動のエネルギー準位に限定しよう．

基底状態の波動関数 $\chi_0(z)$ は距離 $|z|\lesssim a_B$ に拡がり，その範囲でゆっくり変動する

(この関数はゼロとならないので，$z=0$ でゼロとならない)．したがって基底準位に対しては§45の問1の解で用いられた条件が満足されて，この解に基づいた式(6)を用いることができる．この対数発散する積分は，上限は距離 $|z|\sim a_B$ で，下限は距離 $|z|\sim a_H$ で《打ち切られる》(ここで $|z|\sim\rho$ であり，(7)で $\sqrt{\rho^2+z^2}$ を $|z|$ に置きかえることは許されない)．その結果次式がえられる：

$$\varepsilon_0=-\frac{2me^4}{\hbar^2}\log^2\frac{a_B}{a_H}=-\frac{me^4}{2\hbar^2}\log^2\frac{\hbar^3 H}{m^2c|e|^3}. \tag{8}$$

この式はいわば対数的精度を持っている．すなわちここでは比 a_B/a_H 自身が大きいだけでなく，その対数が大きいということが仮定されている．その場合対数の引数の数因子は不確定のままである．

離散スペクトルをもつ励起状態は，場 $\overline{U}(z)\approx-e^2/z$ をもつシュレーディンガー方程式(3)の解として((7)で $z\sim a_B\gg\rho$ と置いて)得られる．この方程式で $\chi=z\varphi(z)$ と置くと次式に帰着する：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{z^2}\frac{d}{dz}\left(z^2\frac{d\varphi}{dz}\right)-\frac{e^2}{z}\varphi=\varepsilon\varphi. \tag{9}$$

これは3次元のクーロン場の問題の s-状態の動径波動関数に対する方程式と形式的に同じである．したがって求める準位は式(36.10)により

$$\varepsilon_n=-\frac{me^4}{2\hbar^2n^2} \tag{10}$$

と与えられる．ここで $n=1,2,3,\cdots$ である．この式もまた対数的精度しか持っていない．次の次数の補正項は基本項と比べて $1/\log(a_B/a_H)$ の比で小さいといえる．

方程式(9)は $z>0$ に対してのみ波動関数を決定する．波動関数は $z<0$ の領域へ $\chi(-z)=\chi(z)$ または $\chi(-z)=-\chi(z)$ の形で接続されることができる．このことに相応して考えている近似では準位(10)は二重に縮退している．しかしながらこの縮退は a_H/a_B に関するより高次の近似でとける．

§ 113. 磁場中の原子

一様な磁場 $\boldsymbol{H}$ の中にある原子を考察しよう．そのハミルトニアンは

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\sum_a\left[\hat{\boldsymbol{p}}_a+\frac{|e|}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_a)\right]^2+U+\frac{|e|\hbar}{mc}\boldsymbol{H}\hat{\boldsymbol{S}} \tag{113.1}$$

である．ここで和はすべての電子についてとられる(電子の電荷は $-|e|$ と書かれる)．U は電子と核および電子どうしの相互作用エネルギーである．$\hat{\boldsymbol{S}}=\sum\hat{\boldsymbol{s}}_a$ は原子の全(電子の)スピン演算子である．

もしも場のベクトル・ポテンシャルを(111.7)の形に選ぶと，すでに注意したように，演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}$ は $\boldsymbol{A}$ と可換である．(113.1)の自乗を展開する際この点に

注意して，磁場がない場合の原子のハミルトニアンを $\hat{H}_0$ とあらわすと，$\hat{H}$ を次の形に書きかえることができる：

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\frac{|e|}{mc}\sum_a \boldsymbol{A}_a\hat{\boldsymbol{p}}_a+\frac{e^2}{2mc^2}\sum_a \boldsymbol{A}_a^2+\frac{|e|\hbar}{mc}\boldsymbol{H}\hat{\boldsymbol{S}}.$$

これに（111.7）の $\boldsymbol{A}$ を代入すると，次式を得る：

$$\hat{H}=H_0+\frac{|e|}{2mc}\boldsymbol{H}\sum_a[\boldsymbol{r}_a\hat{\boldsymbol{p}}_a]+\frac{e^2}{8mc^2}\sum_a[\boldsymbol{H}\boldsymbol{r}_a]^2+\frac{|e|\hbar}{mc}\boldsymbol{H}\hat{\boldsymbol{S}}.$$

しかしながらベクトル積 $[\boldsymbol{r}_a\hat{\boldsymbol{p}}_a]$ は電子の軌道角運動量演算子であり，すべての電子についての和は原子の全軌道角運動量演算子 $\hbar\hat{\boldsymbol{L}}$ を与える．したがって：

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\mu_B(\hat{\boldsymbol{L}}+2\hat{\boldsymbol{S}})\boldsymbol{H}+\frac{e^2}{8mc^2}\sum_a[\boldsymbol{H}\boldsymbol{r}_a]^2 \tag{113.2}$$

（μ_B はボーア磁子である）．演算子

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_{at}=-\mu_B(\hat{\boldsymbol{L}}+2\hat{\boldsymbol{S}}) \tag{113.3}$$

は磁場がない場合の原子の《固有の》磁気モーメント演算子とみなすことができる．

外磁場は原子の準位を分裂させ，全角運動量の方向の縮退をとく（**ゼーマン効果**）．量子数 J, L, S の確定値によって特徴づけられる原子準位のこの分裂エネルギーを求めよう（すなわち，準位の LS 結合の場合を仮定する．§72 参照）．

磁場はひじょうに弱く，$\mu_B H$ は原子のエネルギー準位間の距離に比べて小さく，また準位の微細構造の間隔に比べても小さいと仮定しよう．すると（113.2）の中の第 2 および第 3 項は摂動とみなすことができ，非摂動準位は多重項の各成分である．1 次近似では，磁場に関して自乗の第 3 項は，線形の第 2 項に比べて無視できる．

この近似では分裂エネルギー ΔE は，場の方向への全角運動量の投影値が異なる（非摂動）状態における摂動の平均値によって決定される．この方向を z 軸に選ぶと

$$\Delta E=\mu_B H(\bar{L}_z+2\bar{S}_z)=\mu_B H(\bar{J}_z+\bar{S}_z) \tag{113.4}$$

となる．平均値 $\bar{J}_z$ は単に与えられた固有値 $J_z=M_J$ に等しい．これに対し平均値 $\bar{S}_z$ は次のような《段階的》平均化によって求めることができる（§72 と比較せよ）．

まず演算子 $\hat{\boldsymbol{S}}$ を，M_J は除き S, L, J の与えられた値をもつ原子状態に関し

て平均化する．このようにして平均化された演算子 $\bar{\hat{S}}$ は，自由原子を特徴づける唯一の保存《ベクトル》である $\hat{J}$ の方向だけを《向く》ことができる．したがって

$$\overline{\boldsymbol{S}}=\mathrm{const}\cdot\boldsymbol{J}$$

と書ける．しかしながらこの形では，この等式は条件つきの意味しか持っていない．なぜならばベクトル $\boldsymbol{J}$ の 3 成分は同時に確定値を持たないからである．その z 成分は文字通り次のようになる：

$$\bar{S}_z=\mathrm{const}\cdot J_z=\mathrm{const}\cdot M_J.$$

この両辺に $\boldsymbol{J}$ を掛けると等式

$$\overline{\boldsymbol{S}}\boldsymbol{J}=\mathrm{const}\cdot\boldsymbol{J}^2=\mathrm{const}\cdot J(J+1)$$

がえられる．平均の記号の下にある保存されるベクトル $\boldsymbol{J}$ を代入して，$\overline{\boldsymbol{S}}\boldsymbol{J}=\overline{\boldsymbol{S}\boldsymbol{J}}$ と書こう．平均値 $\overline{\boldsymbol{S}\boldsymbol{J}}$ は固有値

$$\boldsymbol{S}\boldsymbol{J}=\frac{1}{2}[J(J+1)-L(L+1)+S(S+1)]$$

と同じである．これは $\boldsymbol{L}^2, \boldsymbol{S}^2, \boldsymbol{J}^2$ が確定値を持つ状態に等しい（(31.4) と比較せよ）．第二の式から const を定めて，第一の式に代入すると，結局

$$\bar{S}_z=M_J\frac{\boldsymbol{J}\boldsymbol{S}}{\boldsymbol{J}^2} \qquad (113.5)$$

が得られる．

得られた式をまとめて，(113.4) に代入すると，次のような分裂エネルギーに対する最終的な式が求められる：

$$\Delta E=\mu_B g M_J H. \qquad (113.6)$$

ここで

$$g=1+\frac{J(J+1)-L(L+1)+S(S+1)}{2J(J+1)} \qquad (113.7)$$

はいわゆる**ランデの因子**または **g 因子**である．スピンがないとき（$S=0$，したがって $J=L$）$g=1$ であり，$L=0$ のとき（したがって $J=S$）$g=2$ となることに注意せよ[1]．

---

1) 一般式（113.6），（113.7）で記述される分裂は，しばしば異常ゼーマン効果と呼ばれる．この不適切な呼び方が起こった理由は，歴史的に電子スピンが発見されるまでは，式(113.6) で $g=1$ と置いたものによって記述されるものが，正常な効果と考えられたからである．

式 (113.6) は，$M_J=-J,\ -J+1, \cdots, J$ の $2J+1$ 個のすべての値に対してエネルギーの異なる値を与える．言いかえると，磁場は角運動量の方向に関する準位の縮退を完全にとくが，これは電場が $M_J=\pm|M_J|$ をもつ非分裂準位を残すのと対照的である (§76)[1]．もしも $g=0$ ならば（例えば状態 ${}^4D_{1/2}$ のような $J\neq0$ のときにも可能である），式 (113.6) により決定される線形の分裂はなくなることに注意せよ．

§76 で見たように，電場の中の原子のエネルギー準位のずれと原子の平均電気双極子モーメントの間にはある関係がある．磁気的な場合にも同様な関係がある．古典理論においては電荷系のポテンシャル・エネルギーは $-\boldsymbol{\mu H}$ である．ここで $\boldsymbol{\mu}$ は系の磁気モーメントである．同様の関係が磁場の場合にも存在する．量子論ではそれは対応する演算子に変わり，系のハミルトニアンは

$$\hat{H}=\hat{H}_0-\hat{\boldsymbol{\mu}}\boldsymbol{H}=\hat{H}_0-\hat{\mu}_z H$$

のようになる．いま（パラメーター λ としての磁場 H をもつ）式 (11.16) を用いると，磁気モーメントの平均値は

$$\overline{\mu}_z=-\frac{\partial \Delta E}{\partial H} \tag{113.8}$$

となる．ここで ΔE は原子の与えられた状態のエネルギー準位のずれである．これに (113.6) を代入すると，ある方向 z への角運動量の投影の確定値 M_J をもつ状態にある原子は，それと同じ方向に平均の磁気モーメント

$$\overline{\mu}_z=-\mu_B g M_J \tag{113.9}$$

をもつ．

もしも原子がスピンも軌道角運動量ももたないとすると ($S=L=0$)，(113.2) の第 2 項は，1 次近似においても，あるいはそれ以上の高次の近似においても，準位のずれを与えない（それは，$\boldsymbol{L}$ および $\boldsymbol{S}$ に関するあらゆる行列要素はゼロとなるからである）．したがってこの場合，すべての効果は (113.2) の第 3 項による．そして摂動論の 1 次近似において，準位のずれは平均値

$$\Delta E=\frac{e^2}{8mc^2}\sum_a \overline{[\boldsymbol{H}\boldsymbol{r}_a]^2} \tag{113.10}$$

1) これに関連して §76 で電場の場合に適用された議論は，磁場に対しては成り立たない．そのわけは，$\boldsymbol{H}$ が軸性ベクトルであり，したがって磁場を含む平面での鏡映に関して符号を変えるからである．それゆえこの操作によって互いに得られる状態は，本質的に同一の場ではなく，異なる場の中の原子に関するものである．

である．$[\boldsymbol{Hr}_a]^2=H^2r_a^2\sin^2\theta$ と書き，ここで θ は $\boldsymbol{r}_a$ と $\boldsymbol{H}$ との間の角度とする．これを $\boldsymbol{r}_a$ の方向に関して平均すると，$\overline{\sin^2\theta}=1-\overline{\cos^2\theta}=2/3$ ($L=S=0$ をもつ状態の波動関数は球対称であり，したがって方向に関する平均化は距離 r_a に関する平均化とは独立である)．したがって：

$$\Delta E=\frac{e^2}{12mc^2}H^2\sum_a\overline{r_a^2}. \tag{113.11}$$

式 (113.8) で計算される磁気モーメントは，こうして磁場の量に比例する ($L=S=0$ をもつ原子は磁場がないときはもちろん磁気モーメントをもたない)．磁気モーメントを χH の形に書くと，係数 χ を原子の磁気感受率とみなすことができる．それを計算すると次のランジュバンの式が得られる (P. Langevin, 1905)：

$$\chi=-\frac{e^2}{6mc^2}\sum_a\overline{r_a^2}. \tag{113.12}$$

この量は負である．すなわち原子は反磁性である[1]．

もしも $J=0$ であるが $S=L\neq0$ であるならば，磁場に関して1次の準位のずれはないが，摂動 $-\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{at}}\boldsymbol{H}$ の2次の近似にあらわれる磁場に関して2次の効果が，(113.11) の効果より大きくなる[2]．これが起こるわけは次のとおりである．すなわち一般公式 (38.10) によれば，2次近似におけるエネルギー固有値に対する補正は，分母の中に摂動エネルギー準位の差を含む式の和によって与えられ，この場合，この差は準位の微細構造の間隔で，それは非常に小さいからである．§38 で注意したように，基底準位に対する2次近似の補正はいつも負である．したがって，基底状態における磁気モーメントは正の値となる．すなわち $J=0$, $L=S\neq0$ をもつ基底状態にある原子は常磁性である．

磁場が非常に強くて，μ_0H が微細構造の間隔と同程度かあるいはそれ以上になると，準位の分裂は式 (113.6), (113.7) によって予測されるものと異なってくる；この現象は**パッシェン＝バック効果**と呼ばれる．

分裂エネルギーの計算は次の場合に非常に簡単になる．すなわちゼーマン分

---

1) 電子と核との距離の自乗の平均を計算するために，トーマス＝フェルミ模型を用いることができないことを述べておく．トーマス＝フェルミの密度 $n(r)$ を用いると，積分 $\int nr^2dr$ は収束するが，非常にゆっくりであり，それによって得られる値は実験値と非常に異なる．

2) $S=L\neq0$ のとき，遷移 $S,L,J\to S,L,J\pm1$ に対する L_z, S_z の非対角行列要素は，一般的にいってゼロでない．

裂が微細構造の間隔に比べて大きいが，しかしもちろんいままでと同じく，異なる多重項の間の距離に比べて小さい場合である（したがってハミルトニアン(113.2)において，いままでと同じく第2項に比べて第3項を無視できる)．いいかえると，磁場のエネルギーがスピン－軌道相互作用よりかなり大きい場合である[1]．したがって，1次近似ではこの相互作用を無視できる．すると，保存されるのは全角運動量の z 軸への投影ばかりではなく，軌道角運動量およびスピンの投影 M_L および M_S も保存されるので，分裂は次式によって与えられる：

$$\Delta E=\mu_{\mathrm{B}}H(M_L+2M_S). \tag{113.13}$$

多重項分裂は，磁場の中の分裂に重なる．それは与えられた M_L, M_S をもつ状態に関する演算子 $A\hat{\boldsymbol{L}}\hat{\boldsymbol{S}}$ (72.4) の平均値によって決定される（われわれはスピン-軌道相互作用による多重項分裂を考えている)．角運動量の成分の一つに値が与えられると，他の二つの平均値はゼロとなる．したがって $\overline{\boldsymbol{LS}}=M_LM_S$ であるので，次の近似において準位のエネルギーは次式によって決定される：

$$\Delta E=\mu_{\mathrm{B}}H(M_L+2M_S)+AM_LM_S. \tag{113.14}$$

（LS 形でない）任意の形の結合の一般的な場合に，ゼーマン分裂を計算することは不可能である．（弱い磁場において）分裂は磁場に関して1次であり，全角運動量の投影 M_J に比例する，とだけいうことができる．すなわち次の形をもつ：

$$\Delta E=\mu_{\mathrm{B}}g_{nJ}HM_J. \tag{113.15}$$

ここで g_{nJ} は，考えている項に対して特徴的なある定数である（n は J を除く量子数の総体をあらわし，それは項を特徴づけるものである)．これらの係数は個々別々には計算できないが，与えられた電子配位および与えられた全角運動量をもつ，あらゆる可能な原子の状態にわたってとられたそれらの和を与える，応用上重要な式を得ることができることがわかる．

定義により

$$g_{nJ}M_J=\langle nJM_J|L_z+2S_z|nLM_J\rangle$$

である．量 $g_{SLJ}M_J$ は（ここで g_{SLJ} は LS-結合に対応するランデの因子 (113.

1) 磁場の影響がスピン－軌道相互作用と同程度であるような中間の場合には，一般的な形で分裂を計算できない（$S=1/2$ の場合に対する計算は問題1で与えられている)．

7）である）波動関数の他の完全系を用いて計算された対角行列要素

$$g_{SLJ}M_J = \langle SLJM_J | L_z + 2S_z | SLJM_J \rangle$$

である．これらの完全系の関数は，他の完全系からユニタリ変換によって得られる．しかもこれらの変換は対角行列要素の和を不変のままとする（§12参照）．したがって

$$\sum_n g_{nJ}M_J = \sum_{SL} g_{SLJ}M_J,$$

あるいは g_{nJ} および g_{SLJ} は M_J に依存しないので

$$\sum_n g_{nJ} = \sum_{SL} g_{SLJ}. \tag{113.16}$$

与えられた電子配位に対して可能な，与えられた J の値をもつあらゆる状態について和がとられる．これが求めている関係式である．

問　題

1. $S=1/2$ をもつ項のパッシェン＝バック効果による分裂を求めよ．

解　摂動論で磁場およびスピン－軌道相互作用は同時に考慮しなければならない．すなわち摂動演算子は次の形をもつ[1]：

$$\hat{V} = A\hat{\boldsymbol{L}}\hat{\boldsymbol{S}} + \mu_B(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)H.$$

ゼロ次近似のはじめの波動関数として，確定値 $L, S=1/2$，M_L, M_S（L は与えられていて，$M_L=-L, \cdots, L$；$M_S=\pm 1/2$）をもつ状態に対応する関数を選ぶ．摂動状態においては和 $M \equiv M_J = M_L + M_S$ のみが保存されるので（$\hat{V}$ は $\hat{J}_z$ と可換である），分裂項の各成分に M の確定値を対応させることができる．

値 $M_J = \pm(L+1/2)$ は，ただ一つの方法によってのみ実現できる．すなわち，それぞれ $|M_L M_S\rangle = |L\ 1/2\rangle$ および $|-L, -1/2\rangle$ である．したがって，これらの M をもつ状態のエネルギーに対する補正は，単に $|M_L M_S\rangle$ の指定された値をもつ対角行列要素 $\langle M_L M_S | V | M_L M_S \rangle$ である．M の残りの値は二つの方法で実現できる：$|M-1/2, 1/2\rangle$ および $|M+1/2, -1/2\rangle$．ここで各 M には，エネルギーの二つの異なる値が対応する．これらのエネルギーは，これらの二つの状態の間の遷移に対する行列要素からつくられる永年方程式から決定される．$\boldsymbol{LS}$ の行列要素は，行列 $\langle M_L | \boldsymbol{L} | M_L' \rangle$ および $\langle M_S | \boldsymbol{S} | M_S' \rangle$ の積によりただちに計算され，次のようになる：

1）$\hat{V}$ の中には $(\hat{\boldsymbol{L}}\hat{\boldsymbol{S}})^2$ に比例する項（スピン－スピン相互作用）は書かなかった．しかしながら，スピン $S=1/2$ に対して式 $(\hat{\boldsymbol{L}}\hat{\boldsymbol{S}})^2$ は，パウリの行列の特別な性質のために（§55参照），式 $\hat{\boldsymbol{L}}\hat{\boldsymbol{S}}$ に帰着され，したがって $\hat{V}$ に対して書かれた式に含まれる．

$$\langle M_L M_S | \boldsymbol{LS} | M_L M_S \rangle = M_L M_S,$$

$$\langle M+1/2,\ -1/2 | \boldsymbol{LS} | M-1/2,\ 1/2 \rangle = \langle M-1/2,\ 1/2 | \boldsymbol{LS} | M+1/2,\ -1/2 \rangle$$

$$= \frac{1}{2}\sqrt{(L+M+1/2)(L-M+1/2)}.$$

磁場がない場合に，この項は 2 重項をあらわし，その成分の間の距離は $\varepsilon = A(L+1/2)$ である（(72.6) 参照）．これらの準位のうち，低い方をエネルギーの原点に選ぶ．すると磁場の中の準位に対する最終的な式は次の形をもつ：

$$M = \pm(L+1/2) \text{ のとき}\quad E = \varepsilon \pm \mu_B H(L+1),$$

$$M = L-1/2, \cdots, -(L-1/2) \text{ のとき}$$

$$E^{\pm} = \frac{\varepsilon}{2} + \mu_B HM \pm \left[\frac{1}{4}(\varepsilon^2 + \mu_B^2 H^2) + \frac{\mu_B HM\varepsilon}{2L+1}\right]^{1/2}.$$

$\mu_B H/\varepsilon \ll 1$ に対しては

$$E^{+} = \varepsilon + \mu_B HM\frac{2(L+1)}{2L+1}, \qquad E^{-} = \mu_B HM\frac{2L}{2L+1}$$

が得られ，これは式 (113.6)，(113.7) と一致している（そこでは $S=1/2$，$J=L\pm1/2$ と置かなければならない）．$\mu_B H/\varepsilon \gg 1$ に対しては，

$$E^{\pm} = \mu_B H(M \pm 1/2) + \frac{\varepsilon}{2} \pm \frac{M\varepsilon}{2L+1}$$

が得られ，これは (113.4) と一致している．

2.　a の場合における 2 原子分子の項のゼーマン分裂を求めよ．

解　核の運動から生ずる磁気モーメントは，電子の磁気モーメントに比べて非常に小さい．したがって磁場による分子の摂動は，電子系に対する摂動として，すなわち前と同じく $\hat{V} = \mu_B \boldsymbol{H}(\hat{\boldsymbol{L}} + 2\hat{\boldsymbol{S}})$ の形で書かなければならない，ここで $\boldsymbol{L}, \boldsymbol{S}$ は電子の軌道およびスピン角運動量である．

電子状態に関して摂動を平均すると，a の場合に次式を得る：

$$\mu_B H n_z(\Lambda + 2\Sigma) = \mu_B H n_z(2\Omega - \Lambda).$$

分子の回転に関する $\boldsymbol{n}_z$ の平均値は，対角行列要素

$$\langle JM | n_z | JM \rangle = \frac{\Omega M}{J(J+1)}$$

である．ここで $M \equiv M_J$ である（行列要素は式 (87.4) で $K, \Lambda \to J, \Omega$ の置換を行なって作られる行列要素を計算して得られる）．したがって求める分裂は

$$\Delta E = \mu_B HM\frac{\Omega(2\Omega - \Lambda)}{J(J+1)}$$

である．

3.　b の場合に前問と同じ計算を行なえ．

解　求めている分裂を決定する対角行列要素 $\langle \Lambda KJ | V | \Lambda KJ \rangle$ は，§87 で述べた一般的規則により計算を行なうことができるであろう．しかし次の簡単な計算を行なう方が，はるかにわかりやすい．摂動演算子を軌道状態および電子状態に関して平均すると，次

式を得る：

$$\mu_{\mathrm{B}}H(\Lambda n_z+2\hat{S}_z)$$

(スピン演算子はこの平均によって変化しない)．つぎに分子の回転に関して平均すると(n_z の平均値は式 (87.4) により与えられる)：

$$\mu_{\mathrm{B}}H\left(\frac{\Lambda^2}{K(K+1)}\hat{K}_z+2\hat{S}_z\right).$$

最後に，スピン波動関数に関して平均する．すべての平均を行なったあとで，ベクトルの平均値は，保存されるただ一つのベクトルである全角運動量 $\boldsymbol{J}$ に平行にとることができる．したがって次式を得る ((113.5) 参照)：

$$\frac{\mu_{\mathrm{B}}H}{J(J+1)}\left[\frac{\Lambda^2}{K(K+1)}(\boldsymbol{KJ})+2(\boldsymbol{SJ})\right]M$$

($M\equiv M_J$)．または最終的に

$$\Delta E=\frac{\mu_{\mathrm{B}}}{J(J+1)}\left\{\frac{\Lambda^2}{2K(K+1)}[J(J+1)+K(K+1)-S(S+1)]\right.$$
$$\left.+[J(J+1)-K(K+1)+S(S+1)]\right\}HM.$$

4.　反磁性原子が外磁場の中にある．原子の中心における誘導磁場の強さを求めよ．

解　$S=L=0$ に対して，ハミルトニアンの中に磁場に関して1次の摂動は一般に存在せず，したがって原子の波動関数には磁場に関して1次の補正は存在しない．外磁場によって誘導された原子内電流の変化 $\boldsymbol{j}'$ は，(H に関して同じ1次近似において) 電子の速度演算子に対する付加的な項 $(|e|/mc)\boldsymbol{A}$ のみによるものである．したがって次式を得る[1)]：

$$\boldsymbol{j}'=\rho\frac{e^2}{mc}\boldsymbol{A}=-\rho\frac{e^2}{2mc}[\boldsymbol{Hr}]. \tag{1}$$

ここで ρ は原子の中の電子密度である．この付加的な電流によって原子の中心につくられる磁場の強さは，

$$\boldsymbol{H}_{\mathrm{ind}}=\frac{1}{c}\int\frac{[\boldsymbol{rj}']}{r^3}dV$$

である (後の (121.8) と比較せよ)．これに (1) を代入し，被積分関数を $\boldsymbol{r}$ の方向に関して平均すると，次式を得る：

$$\boldsymbol{H}_{\mathrm{ind}}=-\frac{e^2}{3mc^2}\boldsymbol{H}\int\frac{\rho}{r}dV=\frac{e^2}{3mc^2}\varphi_e(0)\boldsymbol{H}. \tag{2}$$

ここで $\varphi_e(0)$ は原子の電子殻によってその中心に作られる磁場のポテンシャルである．

トーマス＝フェルミ模型では $\varphi_e(0)=-1.80Z^{4/3}me^3/\hbar^2$ であるので ((70.8) 参照)，結局：

$$\boldsymbol{H}_{\mathrm{ind}}=-0.60\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2Z^{4/3}\boldsymbol{H}=-3.2\times10^{-5}Z^{4/3}\boldsymbol{H}.$$

---

1)　この式は，外磁場の方向のまわりの，原子の電子殻のラーマー歳差運動に対応する (第Ⅱ巻『場の古典論』§45 参照)．

§ 114. 変動する磁場の中のスピン

磁気モーメントをもち，一様なしかし（時間に関して）変動する磁場の中にある電気的に中性な粒子を考察しよう．ここで問題にしているのは素粒子（たとえば中性子）であってもよいし，複合粒子（原子）であってもよい．磁場は十分弱くて，磁場の中の粒子の磁気エネルギーは粒子のエネルギー準位間の間隔に比べて小さいものと仮定する．すると，粒子の内部状態は与えられたものとして，全体としての粒子の運動を考察することができる．

いま $\hat{\boldsymbol{s}}$ を粒子の《固有の》角運動量演算子としよう．たとえばこれは素粒子のスピンまたは原子の全角運動量 $\boldsymbol{J}$ である．磁気モーメント演算子は (111.1) の形にあらわされる．全体としての中性粒子の運動に対するハミルトニアンは，次の形に書かれる：

$$\hat{H}=-\frac{\mu}{s}\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{H} \tag{114.1}$$

(ハミルトニアンのうちスピンに依存する部分だけを書くことにする).

一様な磁場の中で，この演算子は座標をあらわには含まない[1]．したがって粒子の波動関数は，座標関数およびスピン関数の積に分解される．これらのうち，前者は単に自由運動の波動関数である；以下においてわれわれに興味があるのはスピン部分のみである．任意の角運動量 s をもつ粒子の問題は，より簡単なスピン 1/2 をもつ粒子の運動の問題に帰着できることを示そう (E. Majorana)．このためには，§57 ですでに用いた方法を用いれば十分である．すなわち，スピン s をもつ 1 粒子のかわりに，スピン 1/2 をもつ $2s$ 個の《粒子》からなる系を形式的に導入することができる．すると演算子 $\hat{\boldsymbol{s}}$ はこれらの《粒子》のスピン演算子の和 $\sum \hat{\boldsymbol{s}}_a$ の形にあらわされ，波動関数は $2s$ 個の 1 階スピノールの積の形にあらわされる．するとハミルトニアン (114.1) は $2s$ 個の独立なハミルトニアンの和に分解される：

$$\hat{H}=\sum_a \hat{H}_a, \qquad \hat{H}_a=-\frac{\mu}{s}\boldsymbol{H}\hat{\boldsymbol{s}}_a. \tag{114.2}$$

したがって，$2s$ 個の《粒子》のおのおのの運動は他から独立に決定される．こ

1) これらの議論は，ある粒子が（電荷をもっていようと，なかろうと）非均一磁場の中を運動しているとき，その運動が準古典的とみなすことができるならば，その場合にも適用できる．すると，粒子の軌道に沿って粒子が移動するに伴って変化する磁場は，単に時間の関数とみなすことができて，スピン波動関数の変動に対して同じ方程式を適用することができる．

れが行なわれたあと，2s 個の 1 階スピノールの成分の積のかわりに，ふたたび 2s 階の任意対称スピノールの成分を導入すればよい．

問　題

1. 一様な磁場の中にある，スピン 1/2 をもつ中性粒子のスピン波動関数を求めよ．この磁場は方向に関しては一定であるが，任意の法則 $H(t)$ に従ってその値が変動するものとする．

解 波動関数は次の波動方程式を満足するスピノール ψ^ν である：

$$i\hbar\dot{\psi}^\nu=-2\mu\boldsymbol{H}\hat{\boldsymbol{s}}\psi^\nu. \tag{1}$$

磁場の方向を z 軸に選んで，この方程式をスピノール成分に書きかえる：

$$i\hbar\dot{\psi}^1=-\mu H\psi^1, \qquad i\hbar\dot{\psi}^2=\mu H\psi^2.$$

これから

$$\psi^1=c_1\exp\left(\frac{i\mu}{\hbar}\int Hdt\right), \qquad \psi^2=c_2\exp\left(-\frac{i\mu}{\hbar}\int Hdt\right).$$

定数 c_1, c_2 は初期条件および規格化条件 $|\psi^1|^2+|\psi^2|^2=1$ から定めなければならない．

2. 磁場の値が一定で，方向が z 軸と角度 θ をなしつつ z 軸の回りを（角速度 ω で）一様に回転しつつある一様磁場の中での，前問と同じ計算を行なえ．

解 磁場は次の成分をもつ：

$$H_x=H\sin\theta\cos\omega t, \qquad H_y=H\sin\theta\sin\omega t, \qquad H_z=H\cos\theta.$$

そして (1) より次の連立方程式を得る：

$$\dot{\psi}^1=i\omega_H(\cos\theta\cdot\psi^1+\sin\theta\cdot e^{-i\omega t}\psi^2), \qquad \dot{\psi}^2=i\omega_H(\sin\theta\cdot e^{i\omega t}\psi^1-\cos\theta\cdot\psi^2).$$

ここで $\omega_H=\mu H/\hbar$ である．これらの方程式に

$$\psi^1=e^{-i\omega t/2}\varphi^1, \qquad \psi^2=e^{i\omega t/2}\varphi^2$$

を代入すると，定数係数をもつ連立 1 次方程式が得られ，それを解くと次式が得られる：

$$\psi^1=e^{-i\omega t/2}(c_1e^{i\Omega t/2}+c_2e^{-i\Omega t/2})$$

$$\psi^2=2\omega_H\sin\theta\cdot e^{i\omega t/2}\left[\frac{c_1}{\Omega+\omega+2\omega_H\cos\theta}e^{i\Omega t/2}-\frac{c_2}{\Omega-\omega-2\omega_H\cos\theta}e^{-i\Omega t/2}\right].$$

ここで

$$\Omega=\sqrt{(\omega+2\omega_H\cos\theta)^2+4\omega_H^2\sin^2\theta}$$

である．

§ 115. 磁場の中の電流密度

磁場の中の荷電粒子の運動に対する電流密度の量子力学的表式を求めることにしよう．まず，式

$$\delta H = -\frac{1}{c}\int \boldsymbol{j}\delta\boldsymbol{A}dV \qquad (115.1)$$

から始めることにする[1]．これは，ベクトル・ポテンシャルの変分に対して，空間に分布した電荷のハミルトン関数の変動を与える[2]．量子力学においては，この式は荷電粒子の次のようなハミルトニアンの平均値に対して適用されなければならない：

$$\overline{H} = \int \Psi^*\left[\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 - \frac{\mu}{s}\boldsymbol{H}\hat{\boldsymbol{s}}\right]\Psi dV. \qquad (115.2)$$

変分を行ない，$\delta\boldsymbol{H} = \mathrm{rot}\,\delta\boldsymbol{A}$ であることを考慮すれば，次式を得る：

$$\delta\overline{H} = \int \Psi^*\left[-\frac{e}{2mc}(\hat{\boldsymbol{p}}\delta\boldsymbol{A} + \delta\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{p}}) + \frac{e^2}{mc^2}\boldsymbol{A}\delta\boldsymbol{A}\right]\Psi dV$$
$$-\frac{\mu}{s}\int \mathrm{rot}\,\delta\boldsymbol{A}\cdot\Psi^*\hat{\boldsymbol{s}}\Psi dV. \qquad (115.3)$$

$\hat{\boldsymbol{p}}\delta\boldsymbol{A}$ をもつ項は，部分積分を行なうと次のようになる：

$$\int \Psi^*\hat{\boldsymbol{p}}\delta\boldsymbol{A}\Psi dV = -i\hbar\int \Psi^*\nabla(\delta\boldsymbol{A}\Psi)dV = i\hbar\int \delta\boldsymbol{A}\Psi\nabla\Psi^* dV$$

（無限に遠い表面における積分は，いつものようにゼロとなる）．(115.3) の最後の項に対しても，部分積分を行なうことができるが，同時に，ベクトル解析でよく知られた次式を用いる：

$$\boldsymbol{a}\,\mathrm{rot}\,\boldsymbol{b} = -\mathrm{div}\,[\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}] + \boldsymbol{b}\,\mathrm{rot}\,\boldsymbol{a}.$$

div をもつ項の積分はゼロとなるので，結局次式が残る：

$$\int \Psi^*\hat{\boldsymbol{s}}\Psi\,\mathrm{rot}\,\delta\boldsymbol{A}dV = \int \delta\boldsymbol{A}\,\mathrm{rot}\,(\Psi^*\hat{\boldsymbol{s}}\Psi)dV.$$

以上の結果，最終的には：

---

1) 本節では $\boldsymbol{j}$ は電流密度をあらわすことにする．それは粒子の流れの密度に粒子の電荷 e を掛けたものである．

2) 磁場の中の電荷に対するラグランジュ関数は項 $\frac{e}{c}\boldsymbol{v}\boldsymbol{A}$ を含み，あるいはもしも電荷が空間の中で分布しているならば，$\frac{1}{c}\int \boldsymbol{j}\boldsymbol{A}dV$ を含む．したがって，$\boldsymbol{A}$ の変分に対するラグランジュ関数の変動は

$$\delta L = \frac{1}{c}\int \boldsymbol{j}\delta\boldsymbol{A}dV$$

である．ところがハミルトン関数の無限小変化は，ラグランジュ関数の変化に反対符号をつけたものに等しい（第 I 巻『力学』§ 40 参照）．

$$\delta\overline{H}=-\frac{ie\hbar}{2mc}\int\delta\boldsymbol{A}(\Psi\nabla\Psi^*-\Psi^*\nabla\Psi)dV+\frac{e^2}{mc^2}\int\boldsymbol{A}\delta\boldsymbol{A}\Psi\Psi^*dV$$
$$-\frac{\mu}{s}\int\delta\boldsymbol{A}\,\mathrm{rot}\,(\Psi^*\hat{\boldsymbol{s}}\Psi)dV$$

を得る.

この式を（115.1）と比較すると，電流密度に対する次の式を得る：

$$\boldsymbol{j}=\frac{ie\hbar}{2m}[(\nabla\Psi^*)\Psi-\Psi^*\nabla\Psi]-\frac{e^2}{mc}\boldsymbol{A}\Psi^*\Psi+\frac{\mu}{s}c\,\mathrm{rot}\,(\Psi^*\hat{\boldsymbol{s}}\Psi). \tag{115.4}$$

この式は，ベクトル・ポテンシャルをあらわに含んでいるにもかかわらず，当然のことではあるがまったくの1価関数であることを強調しておこう．このことは，（111.8）に従うベクトル・ポテンシャルのゲージ変換を行なうと同時に，（111.9）に従う波動関数の変換をも行なわなければならないことを思い出して，直接計算を行なえば容易にわかることである.

電流（115.4）と電荷密度 $\rho=e|\Psi|^2$ は当然ながら連続の方程式

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\mathrm{div}\,\boldsymbol{j}=0$$

を満足することが容易に証明される.

（115.4）の最後の項は粒子の磁気モーメントが電流密度におよぼす寄与を与えている．それは $c\,\mathrm{rot}\,\boldsymbol{m}$ の形をもち，ここで

$$\boldsymbol{m}=\frac{\mu}{s}\Psi^*\hat{\boldsymbol{s}}\Psi=\Psi^*\hat{\boldsymbol{\mu}}\Psi \tag{115.5}$$

は磁気モーメントの空間密度である.

式 (115.4) は電流の平均値をあらわしている．それはある演算子——電流密度演算子 $\boldsymbol{j}$——の対角行列要素とみなすことができる．この演算子は，第2量子化の表示で最も簡単に書くことができる．すなわち Ψ および Ψ^* を演算子 $\hat{\Psi}$ および $\hat{\Psi}^+$ に置きかえる（そして一般規則に従って各項で Ψ^+ は Ψ の左側に立たなければならない)．この演算子の非対角行列要素をも決定することができる：

$$\boldsymbol{j}_{nm}=\frac{ie\hbar}{2m}[(\nabla\Psi_n^*)\Psi_m-\Psi_n^*\nabla\Psi_m]-\frac{e^2}{mc}\boldsymbol{A}\Psi_n^*\Psi_m+\frac{\mu}{s}c\,\mathrm{rot}\,(\Psi_n^*\hat{\boldsymbol{s}}\Psi_m). \tag{115.6}$$

第16章　原子核の構造

§ 116. アイソ不変性

現在のところ，**核力**，すなわち原子核の粒子（**核子**）間に働き，それを原子核の中に閉じこめている力の完成した理論は存在しない．こういった関係で，いまのところ，核力の記述にあたっては，首尾一貫した理論が存在する場合に必要とされる以上に，はるかに大幅に実験を頼りにしなければならない．

核子に属する粒子の二つの型は，まず第一に電気的な性質が異なっている．なぜかというと，陽子 (p) は正電荷をもち，中性子 (n) は電気的に中性であるからである．それと同時に両方とも同じスピン 1/2 をもち，またその質量はほとんど等しい（陽子の質量は電子の 1836.1 倍，中性子は 1838.6 倍になっている）．この類似性は偶然ではない．電気的な性質の相違にもかかわらず，陽子と中性子とは互いによく似た粒子であり，この類似性は基本的な意味をもつものである．

もしもこの比較的弱い電気的な力を考えなければ，2 陽子の相互作用の力は 2 中性子間に働く力と非常に似ている．この性質を核力の**荷電対称性**と呼ぶ[1]．

これらの対称性が成り立つ精度で，とくに 2 陽子系 (pp) と 2 中性子系 (nn) はその性質について同一状態をもつと主張できる．この際もちろん，陽子も中性子も同じ統計（フェルミ統計）に従い，pp および nn 系に対しては，波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}_1, \sigma_1; \boldsymbol{r}_2, \sigma_2)$ が同一の対称性をもつ状態，すなわち粒子の座標とスピンの同時置換に対して反対称な状態のみが許されることが重要である．

しかしながら，荷電対称性は，**アイソ不変性**[2]という名称を得た陽子・中性子間のよりいっそう深遠な物理的類似性のあらわれ方の一つにすぎないことが

1) これはとくに，二つのいわゆる**鏡映核**の性質（結合エネルギー，エネルギー・スペクトル，その他）が互いに近いことにあらわれている．鏡映核は，一方の全陽子を中性子で置きかえ，またその逆の置きかえを行なった点が，互いに異なっている核のことである．

2) 文献によってはこの不変性に対してまた**アイソバール不変性**も使われている．

わかっている．このより深遠な規則性によって，(互いにすべての陽子を中性子に置換すること，およびその逆によって得られる) *pp* および *nn* 系のあいだだけでなく，これらの系と異種粒子からなる *pn* 系とのあいだにも類似性が存在することになる．もちろん，ここでは完全な類似性は不可能である．何となれば，同一でない粒子からなる *pn* 系の可能な状態は，あらゆる場合に反対称波動関数をもつ状態に制限される必要はないからである．しかしながら，*pn* 系の可能な状態のなかで，その性質が二つの同一核子の系と非常によく似た状態があることが知られる[1]；これらの状態は反対称波動関数で記述されるのが自然である (*pn* 系の残りの状態は対称な波動関数で記述され，これは *pp* および *nn* 系にはない)．

アイソ不変性は荷電対称性と同様に，電磁的相互作用を無視する条件のときにのみ成立する．大きくはないけれども中性子と陽子の質量の違いが，それが近似である別の原因である；中性子と陽子のあいだの対称性の厳密な成立は，もちろんその質量の厳密な一致を暗に要求しているはずである[2]．

アイソ不変性の記述のために，便利な形式的な方法を導入することができる．アイソ不変性はつまるところ，核子が二つの型のどちらに属するかによらずに，その座標－スピン波動関数 ψ の対称性による核子系の状態の分類を可能にする点にあることに注目すれば，自然にその方法に移ることになる．したがって，求める方法は，系の状態を特徴づけるために，関数 ψ の対称性を一意的に決定するような新しい量子数を導入する可能性を与えるものでなければならない．しかし，われわれは，スピン 1/2 の粒子の系の性質に関連して，同様な事情をすでに扱ってきた．すなわちわれわれは，このような系の全スピン S を与えると，粒子のおのおののスピンの投影 σ が二つの可能な値 ($\pm 1/2$) のうちのいずれをとるかによらずに，その座標波動関数 φ の対称性を一意的に決定することを見てきた (§63 参照)．

したがって，アイソ不変性の形式的記述のためには，中性子と陽子を同一粒子 (核子) の二つの異なる《荷電状態》とみなす必要がある；そしてこれらは，

1) これは，最初に陽子による陽子と中性子の散乱の実験データの解析を基礎にしてブライト，コンドンおよびプレゼントにより示された (G. Breit, E. Condon, R. D. Present, 1936)．

2) 実際に中性子と陽子の質量のこの差もまた電磁的起源をもつと考える必要がある．

形式的な性質が1/2のスピン・ベクトルと類似した，新しいベクトル$\boldsymbol{\tau}$の投影値によって区別される．ふつう**アイソスピン**[1]と呼ばれるこの新しい量は，ある補助的な**アイソ空間**ξ, η, ζ（もちろん，現実の空間とは何の関係もない）のなかのベクトルである．しかしながら，これの物理的な意味は明らかでなく，首尾一貫した理論をつくりあげた結果でのみ明らかにされ得るものである．

核子のアイソスピンのζ軸への投影は二つの値$\tau_\zeta=\pm 1/2$のみを取り得る．$+1/2$の値は陽子を，$-1/2$の値は中性子を記述する[2]．いくつかの核子のアイソスピンは，ふつうのスピンの合成則に従って，系の全アイソスピンへと合成される．この際，系の全アイソスピンのζ-成分は，その全成分粒子のτ_ζの値の和に等しい．陽子数（すなわち原子番号）がZ，中性子数がN，質量数が$A=Z+N$の核に対しては

$$T_\zeta=\sum\tau_\zeta=\frac{Z-N}{2}=Z-\frac{A}{2} \tag{116.1}$$

が成り立つ．すなわち，核子数が与えられたとき，T_ζは系の全電荷を決定する．したがって，単なる電荷の保存をあらわすところのT_ζという量の厳密な保存則が成り立つことは明らかである．

ところが系の全アイソスピンの絶対値Tは，系の波動関数の《荷電部分》ωの対称性を決定する；これは全スピンSがスピン波動関数の対称性を決定するのと同様である．これにより，それはまた座標－スピン（すなわちふつうの）波動関数ψの対称性をも決定する；なぜかというと，核子系の全波動関数（すなわち，積$\psi\omega$）は定まった対称性をもつからである：すなわち，すべてのフェルミオンに対するのと同様に，粒子の座標，スピンおよび《荷電変数》τ_ζの同時交換に関して反対称でなければならない．したがって，任意の核子系の波動関数ψに定まった対称性が存在することは，上述の枠組の中で量Tの保存によってもあらわすことができる．

また別の言葉で，アイソ不変性はアイソ空間での任意の回転に対する不変性であるということもできる．（Tの値および残りの量子数が与えられたときに）T_ζの値だけが異なる状態は，その性質を同じくする．とくに，荷電対称性——

1) これはハイゼンベルクにより導入され（1932），カッセンとコンドンによりアイソ不変性の記述に用いられた（B. Cassen, E. U. Condon, 1936）．

2) 文献にはこの逆の定義も使われている．

全中性子の陽子による置換およびその逆に対する系の性質の不変性——はアイソ不変性の特別な場合で，ここでは同時にすべての τ_ζ の符号を変えること，すなわちアイソ空間で $\xi\eta$-面内にある軸のまわりの角度180°の回転に対する不変性として記述される．

またクーロン相互作用によるアイソ不変性の明らかな破壊を，この扱いでは形式的に見ることができる：それは，クーロン相互作用は電荷，すなわち $\xi\eta\zeta$-空間内の回転に対して不変でないアイソスピンの ζ-成分に依存するからである．

たとえば2核子系を考察しよう．その全アイソスピンは $T=1$ および $T=0$ の値をとることができる．$T=1$ に対しては投影値は $T_\zeta=1,\ 0,\ -1$ が可能である．これらの値は（116.1）に従って，電荷の値 2, 1, 0 に対応する．すなわち，$T=1$ の系は pp, pn, nn として実現される．$T=1$ をもつ波動関数の荷電部分 ω は（スピンの値 $S=1$ が対称なスピン関数に対応したのと同様．§62参照）対称である．したがって，$T=1$ の値はふつうの波動関数 ψ が反対称な状態に対応する．$T=0$ に対しては $T_\zeta=0$ だけが可能であり，これに対応する関数 ω は反対称である；したがって，これには対称な波動関数 ψ をもつ pn 系の状態が対応する．

スピン演算子 $\hat{\boldsymbol{s}}$ がスピン変数 σ に作用するのと同様に，アイソスピンには波動関数の荷電変数 τ_ζ に作用する演算子 $\hat{\boldsymbol{\tau}}$ が対応する．これら相互間の完全な形式的類似性のために，演算子 $\hat{s}_x$, $\hat{s}_y$, $\hat{s}_z$ があらわされた行列と全く同じパウリ行列(55.7)によって，演算子 $\hat{\tau}_\xi$, $\hat{\tau}_\eta$, $\hat{\tau}_\zeta$ があらわされる．

ここで，これらの演算子の簡単で直観的な意味をもつ結合の若干について述べよう．和

$$\hat{\tau}_+=\hat{\tau}_\xi+i\hat{\tau}_\eta=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}$$

は，中性子の波動関数に作用してそれを陽子の波動関数に変え，陽子の波動関数に作用するとそれをゼロにする演算子である．同様に演算子

$$\hat{\tau}_-=\hat{\tau}_\xi-i\hat{\tau}_\eta=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{pmatrix}$$

は陽子を中性子に変え，中性子を《消滅》させる．最後に演算子

$$\frac{1}{2}+\hat{\tau}_\zeta=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}$$

は陽子の波動関数を不変に保ち，中性子を消滅させる；これに e を掛けると，核子の荷電の演算子と呼ぶことができる．

さらに2粒子のアイソスピンの演算子 $\hat{\boldsymbol{\tau}}_1$, $\hat{\boldsymbol{\tau}}_2$ を使って，これらの粒子相互の交換の演算子 $\hat{P}$ がどのようにあらわされるかを示そう．定義に従って，2粒子系の波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}_1, \sigma_1; \boldsymbol{r}_2, \sigma_2)$ に対するこの演算子 $\hat{P}$ の作用の結果は，これらの粒子の座標およびスピン，すなわち変数 $\boldsymbol{r}_1, \sigma_1$ と $\boldsymbol{r}_2, \sigma_2$ との交換に帰着する．この演算子の固有値は ±1 に等しく，対称あるいは反対称な関数 ψ に対して作用すると：

$$\hat{P}\psi_{\mathrm{sym}}=\psi_{\mathrm{sym}}, \qquad \hat{P}\psi_{\mathrm{ant}}=-\psi_{\mathrm{ant}}. \tag{116.2}$$

われわれは前に，関数 ψ_{sym} および ψ_{ant} が，全アイソスピンの値 $T=0$ および $T=1$ をもつ荷電関数 ω_T に対応することを見た．したがって，もしもわれわれが演算子 $\hat{P}$ を荷電変数に作用する形にあらわそうとすれば，次の性質

$$\hat{P}\omega_0=\omega_0, \qquad \hat{P}\omega_1=-\omega_1 \tag{116.3}$$

をもつ必要がある．演算子 $1-\hat{\boldsymbol{T}}^2$ がこの条件を満足する；ここで ω_T が固有値 $T(T+1)$ に対応する演算子 $\hat{\boldsymbol{T}}^2$ の固有関数であることに気づけば，これは容易に確かめることができる．最後に $\boldsymbol{T}=\boldsymbol{\tau}_1+\boldsymbol{\tau}_2$ と書き，$\boldsymbol{\tau}_1^2$ と $\boldsymbol{\tau}_2^2$ が同一の確定値 $\tau(\tau+1)=3/4$ をもつことを考慮すれば，求める最終式

$$\hat{P}=1-\hat{\boldsymbol{T}}^2=-\frac{1}{2}-2\hat{\boldsymbol{\tau}}_1\hat{\boldsymbol{\tau}}_2 \tag{116.4}$$

を得る[1]．

核子系の種々の物理量の行列要素に対して，アイソスピンに関する一定の選択規則が存在する (L. A. Radicati, 1952)．F を，次のような加算的性質をもつ（任意のテンソル性の）ある量であるとしよう．すなわち，ある系に対する F の値が個々の核子に対する値の和に等しいという意味で加算的であるとする．このような量の演算子を

$$\hat{F}=\sum_p \hat{f}_p+\sum_n \hat{f}_n$$

1)　粒子のふつうのスピンからつくったこのような形の演算子には，§62 の問題ですでに出会っている．

の形にあらわそう；ここで和は系内のすべての陽子と中性子にわたって行なうものとする．この式は恒等的に

$$\hat{F}=\sum\left(\frac{1}{2}+\hat{\tau}_\zeta\right)\hat{f}_p+\sum\left(\frac{1}{2}-\hat{\tau}_\zeta\right)\hat{f}_n$$

$$=\frac{1}{2}\sum(\hat{f}_p+\hat{f}_n)+\sum(\hat{f}_p-\hat{f}_n)\hat{\tau}_\zeta \qquad (116.5)$$

の形に書きかえることができる．ここで各項の和は（陽子と中性子も同様に）すべての核子について行なわれる．(116.5) の第1項はアイソ空間でのスカラーで，第2項はベクトルの ζ-成分である．したがって，これらに対しては，ふつうの空間で成り立った，スカラーとベクトルに対する角運動量についての選択規則と同じ選択規則が，アイソスピンについても成り立つ．すなわち，アイソスカラーに対しては T の変化のない遷移だけが許される（§29参照）；これに対し，アイソベクトルの ζ-成分は，$\Delta T=0$，±1 の変化を伴う遷移に対してのみ行列要素をもつ．ただしここで $T_\zeta=0$ の二つの状態間の遷移に対しては，すなわち同数の中性子と陽子をもつ系に対しては $\Delta T=0$ の遷移も禁止されるという付加的条件がつく（最後の選択規則は $\Delta T=0$ の遷移の行列要素が T_ζ に比例することからきている．(29.7) 参照）．

たとえば，原子核の双極モーメントに対しては，f_p という量の役割を積 $e\boldsymbol{r}$ が演じ，他方 $f_n=0$ である．このとき，(116.5) の第1項は

$$\frac{e}{2}\sum\boldsymbol{r}=\frac{e}{2m}\sum m\boldsymbol{r}$$

となり，これは重心の動径ベクトルに比例し，適当な座標原点を選ぶことによりゼロになる；いいかえれば，核の双極モーメントはアイソベクトルの ζ-成分に帰着する．

§117．核　　力

核子間に働く固有の**核力**は，とくにその小さい作用半径が特徴的である；それは 10^{-13} cm の程度の距離で指数関数的に減少する．

非相対論的極限で，核力は核子の速度には依存せず，ポテンシャルをもつということができる．（核内核子の速度はだいたい光速の1/4になるからである．下記参照）．2核子の相互作用のポテンシャル・エネルギー U は，それらの相

対距離 r のみならず，それらのスピンにも依存する．ここでスピン依存性はけっして小さくない[1]．r への正確な依存性は，もちろん，首尾一貫した核力の理論によってのみ確立され得るものである．ところがスピン依存性は，スピン演算子の性質と結びついた，簡単な考察からでも見いだすことができる．

相互作用 U が依存することができる合計三つのベクトルがわれわれの自由になる：それらは 2 核子間の動径ベクトル方向の単位ベクトル $\boldsymbol{n}$，二つの核子のスピン $\boldsymbol{s}_1$ および $\boldsymbol{s}_2$ である．スピン 1/2 の演算子の一般的性質に従って，スピンの関数はすべて 1 次関数になる（§55）．そのほかに，積 $\boldsymbol{ns}$ は真正スカラーでなく擬スカラーであることも考慮する必要がある（なぜかというと，$\boldsymbol{n}$ は極性ベクトル，$\boldsymbol{s}$ は軸性ベクトルであるからである）．これらの事情のために，三つのベクトル $\boldsymbol{n}$, $\boldsymbol{s}_1$, $\boldsymbol{s}_2$ から合計二つの独立なスカラー量をつくることができることは明らかである：それらは $\boldsymbol{s}_1\boldsymbol{s}_2$ および $(\boldsymbol{ns}_1)(\boldsymbol{ns}_2)$ で，どちらもスピンのおのおのについての 1 次式である[2]．

したがって，スピン依存性に関して，2 核子の相互作用の演算子は三つの独立な項の和の形にあらわされる：

$$\hat{U}_{\mathrm{ord}}=U_1(r)+U_2(r)(\hat{\boldsymbol{s}}_1\hat{\boldsymbol{s}}_2)+U_3(r)[3(\hat{\boldsymbol{s}}_1\boldsymbol{n})(\hat{\boldsymbol{s}}_2\boldsymbol{n})-\hat{\boldsymbol{s}}_1\hat{\boldsymbol{s}}_2]. \qquad (117.1)$$

これらのうち一つはスピンに依存せず，二つはスピンに依存する．第 3 項は $\boldsymbol{n}$ の方向について平均するとゼロになるような形に書かれた；この項のように書かれた力はふつう**テンソル力**と呼ばれる．

われわれは相互作用（117.1）に添字《ord》を書き添えたが，これはこの演算子が核子の荷電状態を変えないことを強調するためである．これらの相互作用と並んで，結果として陽子が中性子に転換され，またその逆になるような相互作用も許される．この《交換》相互作用は，形の上から，粒子の交換の演算子（116.4）が存在する点が演算子（117.1）と異なっている：

$$\hat{U}_{\mathrm{exch}}=\{U_4(r)+U_5(r)(\hat{\boldsymbol{s}}_1\hat{\boldsymbol{s}}_2)+U_6(r)[3(\hat{\boldsymbol{s}}_1\boldsymbol{n})(\hat{\boldsymbol{s}}_2\boldsymbol{n})-\hat{\boldsymbol{s}}_1\hat{\boldsymbol{s}}_2]\}\hat{P}. \qquad (117.2)$$

全相互作用の演算子は和

$$\hat{U}=\hat{U}_{\mathrm{ord}}+\hat{U}_{\mathrm{exch}} \qquad (117.3)$$

1) これに関連して，核子の相互作用は電子の相互作用とは本質的に異なっている．後者ではスピン－スピン相互作用は純粋に相対論的なもので，（原子内では）小さい．

2) ここでは，核力は空間反転に対して不変であること，すなわち擬スカラー項を含まないものと考えている．現在まで，これをくつがえすような実験データは存在しない．

で与えられる．このようにして2核子の相互作用は，それらのあいだの距離の6個の異なる関数で特徴づけられる．一般にこれらすべての項は同程度の大きさの量である[1]．

(117.1) および (117.2) にあらわれるスピン演算子は，全スピンの演算子 $\boldsymbol{S}$ を使ってあらわすことができる．実際に，等式 $\hat{\boldsymbol{S}}=\hat{\boldsymbol{s}}_1+\hat{\boldsymbol{s}}_2$ および $\hat{\boldsymbol{S}}\boldsymbol{n}=\hat{\boldsymbol{s}}_1\boldsymbol{n}+\hat{\boldsymbol{s}}_2\boldsymbol{n}$ の自乗をつくり，$\hat{\boldsymbol{s}}_1^2=\hat{\boldsymbol{s}}_2^2=3/4$，$(\hat{\boldsymbol{s}}_1\boldsymbol{n})^2=(\hat{\boldsymbol{s}}_2\boldsymbol{n})^2=1/4$ ((55.10) 参照) を考慮すれば

$$\hat{\boldsymbol{s}}_1\hat{\boldsymbol{s}}_2=\frac{1}{2}\left(\hat{\boldsymbol{S}}^2-\frac{3}{2}\right),\qquad (\hat{\boldsymbol{s}}_1\boldsymbol{n})(\hat{\boldsymbol{s}}_2\boldsymbol{n})=\frac{1}{2}\left[(\hat{\boldsymbol{S}}\boldsymbol{n})^2-\frac{1}{2}\right]\qquad(117.4)$$

を得る．

演算子 $\hat{\boldsymbol{S}}^2$ は演算子 $\hat{\boldsymbol{S}}$ と可換である；したがって，(117.1) および (117.2) の始めの2項で記述される相互作用は系の全スピンのベクトルを保存する．ところがテンソル型相互作用は，いま見たように演算子 $(\hat{\boldsymbol{S}}\boldsymbol{n})^2$ を含む；これは $\hat{\boldsymbol{S}}^2$ とは可換だが，ベクトル $\hat{\boldsymbol{S}}$ 自身とは可換でない．その結果，全スピンの絶対値だけは保存されるが，その方向は保存されない．

2核子系の全スピン S はゼロおよび1の値をとることができる．その全アイソスピン T もこれと同じ二つの値をとることができる．したがって，この系のすべての可能な状態は量子数の対 S, T の値を異にする四つの群に分けられる．これらの群のいずれの状態に対しても，相互作用の演算子は次の形になる：それは ($S=0$ のとき) $A(r)$ あるいは ($S=1$ のとき) $A(r)+B(r)[(\hat{\boldsymbol{S}}\boldsymbol{n})^2-2/3]$ であり，これらは一般の演算子 (117.3) からそれぞれの場合に対して導かれる (問題1参照)[2]．

---

1) また，核子の速度に依存する相互作用は，速度について線形である近似では，次の型の演算子で記述されることを指摘しよう：

$$[\varphi_1(r)+\varphi_2(r)\hat{P}]\hat{\boldsymbol{L}}\hat{\boldsymbol{S}}.$$

ここで $\boldsymbol{L}=[\boldsymbol{r}\boldsymbol{p}]$ は核子の相対運動の軌道角運動量である ($\boldsymbol{p}$ はその運動量である)．そして $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2$ である．この演算子は二つの $\boldsymbol{r}$ の関数を含んでいる．$\boldsymbol{p}\boldsymbol{n}$ および $\boldsymbol{S}\boldsymbol{n}$ の形の項は反転および時間反転に関する不変性の要求から除かれる．

2) 重陽子の性質に関する実験データは，$T=0$，$S=1$ のとき核子の相互作用は深い《ポテンシャルの井戸》をもつ強い引力を示すことがわかる［テンソル力の存在のために，これらの事実を関数 $A(r)$，$B(r)$ の性質の形で定式化するのが困難である］；このほか，(観測される重陽子の4重極モーメントの符号から考えて) この状態では テンソル力の係数 $B(r)$ が負であることを主張することができる．核子の散乱の実験データから，$T=1$，$S=0$ のときもまた引力になるが，これはかなり弱く，とくに安定な2粒子系をつくるのを許さないようなものであることがわかる．

S および T が与えられたとき，系の状態は全角運動量 J および偶奇性で分類される．すでに知っているように，$T=0$ の値は対称な波動関数 ψ，$T=1$ の値は反対称な波動関数 ψ をもつ状態に対応する．他方，S の値はスピン変数に関する波動関数の対称性を決定する（$S=1$ のとき対称，$S=0$ のとき反対称）ので，S, T の対の値を与えることにより，空間変数に関する波動関数の対称性，すなわち状態の偶奇性が決定されることは明らかである．したがって，アイソスピン $T=0$ をもつ系の状態は，偶の 3 重項 ($S=1$) または奇の 1 重項 ($S=0$) だけになり得るが，アイソスピン $T=1$ の系の状態は，奇の 3 重項または偶の 1 重項になることは明らかである．

スピンはベクトルとして保存されないので，一般に軌道角運動量も保存されないはずである（和 $\mathbf{J}=\mathbf{L}+\mathbf{S}$ だけが保存される）．それにもかかわらず，絶対値 L は保存されるように見えることもある．それは単に，J と S の値と偶奇性（あるいは J，S および T）が与えられることが，L の一つの定まった値のときにだけ許されることが起こり得るためである（2 粒子系の偶奇性は $(-)^L$ であることを思い起こそう）．したがって，$S=1$，$J=1$ をもつ奇状態は，$L=1$ だけをもつこと，すなわち $^3P_1$ 状態になることができる．これに対して，そのほかの場合には，J, S および偶奇性の与えられた値は，二つの異なる L の値に対応することができるために，L は保存されない．たとえば，$S=1$，$J=2$ をもつ奇状態は，$L=1$ および $L=3$ になることができる；すなわち，このような状態は $^3P_2+{}^3F_2$ の重ね合わせになる．

このようにして，次のような 2 核子系の可能な状態に到達する（添字 ± は偶奇性をあらわす）：

$$T=1 \text{ のとき：}\ {}^3P_0^-,\ {}^3P_1^-,\ ({}^3P_2+{}^3F_2)^-,\ {}^3F_3^-, \cdots;\ {}^1S_0^+,\ {}^1D_2^+,\ {}^1G_4^+, \cdots,$$

$$T=0 \text{ のとき：}\ ({}^3S_1+{}^3D_1)^+,\ {}^3D_2^+,\ ({}^3D_3+{}^3G_3)^+, \cdots;\ {}^1P_1^-,\ {}^1F_3^-, \cdots.$$

一般に核力は加算的ではない．これは，2 個以上の核子からなる系のなかの相互作用は，そのなかのすべての粒子対の相互作用の和になるのではないことを意味している．しかしながら，3 体力その他の相互作用はたぶん，2 体の相互作用に比べて比較的めだたない役割しかしないだろう；したがって，複雑な原子核の性質の考察の際には，大部分は 2 体相互作用の性質を基礎にしてよいであろう．

原子核について実験データは，粒子数Aが大きくなるに従って，核子系は巨視的な《核物質》のように振舞いはじめ，体積とエネルギーはAに比例して増大する（これは陽子のクーロン相互作用，および核の自由表面の存在に結びついた効果を除いた精度でのことである）．これらの現象に関連した核力の性質を核力の**飽和性**と呼ぶ．

この性質の存在は，核子対の相互作用を決定する関数 $U_1, \cdots, U_6$ に一定の制限を課することになる．すべての粒子が核力の作用半径の大きさの体積内に押し込められたとしよう；このときすべての粒子対は互いに作用する．もしもこのとき，すべての対のあいだに引力が働くような，なんらかの核子の配位（および核子のスピンの向き）が存在すれば，このような系のポテンシャル・エネルギーは A^2 に比例する負の量になるだろう．するとこのような系の運動エネルギーは $A^{5/3}$ に比例する正の量となる；すなわち A のより少ないベキである[1)]．このような条件の下で，十分な数の核子の集まりは，実際に A に依存しない小さい体積に集中するだろうことは明らかである；すなわち核物質をつくることができない．したがって，核力の飽和性の条件は，A^2 に比例する負の相互作用のエネルギーをもたらすような配位が存在しない，という条件であらわされなければならない（問題2参照）．

核物質の体積と粒子数との比例関係は

$$R = r_0 A^{1/3} \tag{117.5}$$

の形の関係式であらわされる；これは核半径Rとそのなかにある粒子数Aとを結びつけている．（核による電子の散乱の）実験データから $r_0 \approx 1.1 \times 10^{-13}$ cm という値になる．

核物質中の核子の最大運動量を求めよう（§70参照）．物理空間の単位体積中にあり，$p \leq p_0$ の運動量をもつ粒子に対応する位相空間の体積は $4\pi p_0^3/3$ である．これを $(2\pi\hbar)^3$ で割ると，同時に2個の陽子と2個の中性子が入っている《細胞》の数が得られる．陽子数が中性子数に等しいと置いて

$$4\frac{4\pi}{3}\left(\frac{p_0}{2\pi\hbar}\right)^3 = \frac{A}{V}$$

1）与えられた体積に粒子が押し込められる密度 n は粒子数 A に比例する．各粒子の運動エネルギーは $n^{2/3}$ に比例する（(70.1) を見よ）．したがって，全運動エネルギーは $\sim AA^{2/3}$ である．

を得る（ここで V は原子核の体積である）．これに（117.5）を代入して

$$p_0=\left(\frac{3\pi^2 A}{2V}\right)^{1/3}\hbar=\frac{(9\pi)^{1/3}\hbar}{2r_0}=1.4\times10^{-14}\,\mathrm{g\cdot cm\cdot sec^{-1}}$$

を得る．対応するエネルギー $p_0^2/2m_p$（m_p は核子の質量である）は $\sim$30 MeV となり，速度は $p_0/m_p\approx c/4$ である．

問　　題

1. S, T の確定値をもつ状態にある 2 核子系の相互作用の演算子を求めよ．

解　求める演算子 $\hat{U}_{ST}$ は関係式（116.3）および（117.4）を考慮して，一般式（117.1）-(117.3) から得られる：

$$\hat{U}_{00}=U_1-\frac{3}{4}U_2+U_4-\frac{3}{4}U_5,$$

$$\hat{U}_{01}=U_1-\frac{3}{4}U_2-U_4+\frac{3}{4}U_5,$$

$$\hat{U}_{10}=U_1+\frac{1}{4}U_2+U_4+\frac{1}{4}U_5+\frac{1}{2}(U_3+U_6)[3(\hat{S}\boldsymbol{n})^2-2],$$

$$\hat{U}_{11}=U_1+\frac{1}{4}U_2-U_4-\frac{1}{4}U_5+\frac{1}{2}(U_3-U_6)[3(\hat{S}\boldsymbol{n})^2-2].$$

2. テンソル力がないと仮定して，核力の飽和性の条件を見いだせ；ただし，残りのすべての型の力の作用半径は同一と仮定せよ．

解　A 個の核子からなる系の状態に対し，いくつかの極限の場合（それらの中間に他のすべての可能な場合がある）を考察し，この系の《平均的》な核子対の相互作用が正になる条件を書こう．

原子核の全スピンおよび全アイソスピンが可能な最大値をとるとしよう：すなわち $S_{\mathrm{nuc}}=T_{\mathrm{nuc}}=A/2$ である（系のすべての粒子が平行なスピンをもつ陽子である）．このとき，各核子対に対して $S=T=1$ であり，したがって，条件

$$U_{11}>0 \tag{1}$$

を得る．

今度は $T_{\mathrm{nuc}}=A/2$, $S_{\mathrm{nuc}}=0$ としよう．このとき各核子対に対して $T=1$ であるが，個々の核子に対しては s_z の平均値はゼロに等しい．後者は核子が等しい確率で $s_z=1/2$ と $s_z=-1/2$ をもち得ることを意味している；この条件のもとで核子対が $S=0$ あるいは $S=1$ の状態になる確率は，それぞれ，1/4 および 3/4 である（これらは S_z の可能な値の数 $2S+1$ に比例している）．したがって，対の平均エネルギーが正になる条件は：

$$\frac{1}{4}U_{01}+\frac{3}{4}U_{11}>0. \tag{2}$$

同様にして，$T_{\mathrm{nuc}}=0$, $S_{\mathrm{nuc}}=A/2$ をもつ状態を考察すると，条件

$$\frac{1}{4}U_{10}+\frac{3}{4}U_{11}>0 \tag{3}$$

が得られ.

$T_{\rm nuc}=S_{\rm nuc}=0$ の状態では，核子対が $S=T=1$ をもつ確率は $3/4\cdot3/4$ であり，$T=1$, $S=0$ をもつ確率は $3/4\cdot1/4$ 等々である．これから条件

$$\frac{9}{16}U_{11}+\frac{3}{16}(U_{10}+U_{01})+\frac{1}{16}U_{00}>0 \tag{4}$$

が求められる.

最後に，系が $A/2$ 個の陽子と $A/2$ 個の中性子からなるとしよう．ここですべての陽子のスピンが互いに平行で，すべての中性子のスピンと反平行であるとしよう．個々の核子は等しい確率で p あるいは n になること，すなわち $\tau_\zeta=1/2$ あるいは $\tau_\zeta=-1/2$ となることができる；核子対が $T=0$ をもつ確率は $1/4$ である．このとき核子対のうちの一つは p で他は n である；したがって $S_z=0$ である．この S_z の値は等しい確率で $S=0$ あるいは $S=1$ の状態から実現されている．したがって，対が $T=0$, $S=0$ あるいは $T=0$, $S=1$ の状態にある確率は，それぞれ $1/4\cdot1/2=1/8$ に等しい．$T=1$, $S=0$ をもつ状態もこの確率であり，$T=S=1$ の状態になる確率は残りの $5/8$ である．これらすべてを考慮して，条件

$$\frac{1}{8}(U_{00}+U_{01}+U_{10})+\frac{5}{8}U_{11}>0 \tag{5}$$

を得る.

不等式 (1)-(5) は，求めている核力の飽和性の条件の組である.

§ 118. 殻　模　型

核の多くの性質は**殻模型**を使ってみごとに記述することができる；この概念は基本的に原子の電子殻構造の記述と類似している．この記述では，核内の各核子は，残りのすべての核子の全体がつくる自己無撞着の場のなかを運動するものとみなされる（核力の作用半径が小さいので，この場は核《表面》で限られた体積の外では急激に減衰する）．したがって，核全体としての状態は個々の核子の状態を列挙することによって記述される.

自己無撞着の場は球対称である；このとき当然，核の重心が対称の中心である．しかしながら，これに関連して次のような困難が起こる．自己無撞着の場の方法では，系の波動関数は個々の粒子の波動関数の積（あるいは積の適当な対称和）としてつくられる．しかしこのような関数は重心が動かないことを保証しない：その波動関数を使って計算された重心の速度の平均値はゼロに等し

くても，それと同じ波動関数はゼロと異なる速度の値に有限の確率を与える[1].

任意の物理量を自己無撞着の場の方法の波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_A)$ を使って計算するときに，あらかじめ重心運動を消去することによって，この困難を避けることができる．$f(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{p}_i)$ を何かある物理量をあらわす，核子の座標と運動量の関数であるとしよう．ここで波動関数 ψ を使ってこの行列要素を計算するとき，$\psi(\boldsymbol{r}_i)$ を変えないで，関数 f の引数の置換

$$\boldsymbol{r}_i \longrightarrow \boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{R}, \qquad \boldsymbol{p}_i \longrightarrow \boldsymbol{p}_i - \frac{\boldsymbol{P}}{A} \tag{118.1}$$

を行なう必要がある．ここで $\boldsymbol{R}$ は核の重心の動径ベクトルで，A はその粒子数，$\boldsymbol{P}$ は全体としての運動の運動量である．置換 (118.1) の 2 番目は，核子の速度から重心の速度 $\boldsymbol{V}$ の引き算 $\boldsymbol{v}_i \rightarrow \boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{V}$ に対応する．この重心の速度は運動量 $\boldsymbol{P}$ と $\boldsymbol{P} = Am_p\boldsymbol{V}$ によって結ばれている (S. Gartenhaus, C. Schwartz, 1957).

たとえば，核の双極モーメントの演算子は $\boldsymbol{d} = e\sum \boldsymbol{r}_p$ である；ここで和は核内のすべての陽子について行なわれる．ところがこの行列要素を自己無撞着の場の方法で計算するためには，この演算子を演算子 $e\sum(\boldsymbol{r}_p - \boldsymbol{R})$ で置きかえなければならない．核の重心の座標は

$$\boldsymbol{R} = \frac{1}{A}\left(\sum_p \boldsymbol{r}_p + \sum_n \boldsymbol{r}_n\right)$$

である (和は全陽子および中性子について行なわれる)．核内の陽子数は Z であるから，結局，双極モーメントの演算子は

$$e\sum_p \boldsymbol{r}_p \longrightarrow e\left(1 - \frac{Z}{A}\right)\sum_p \boldsymbol{r}_p - e\frac{Z}{A}\sum_n \boldsymbol{r}_n \tag{118.2}$$

に従って置きかえられなければならない．陽子はここでは《有効電荷》$e(1-Z/A)$ をもち，中性子は《電荷》$-eZ/A$ を伴ってあらわれる．双極モーメントの計算の際に生ずる補正項の相対的な大きさの程度は，(118.2) から ~ 1 であることを指摘しよう．これに対し，磁気モーメントおよび次の電気的多重極モーメントの計算の際の補正は，容易にわかるように，相対的な大きさの程度が $\sim 1/A$ であることがわかる．

非相対論的近似では，自己無撞着の場と核子との相互作用は核子のスピンに

---

1) 原子内電子の場合には，このような困難は一般には起こらない．それは重心の不動性は，それが動かない重い原子核の位置と一致することによって自動的に保証されている．

は依存しない：このような依存性は $\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{n}$ に比例する項によってのみあらわされ得るはずである；ここで $\boldsymbol{n}$ は核子の動径ベクトル $\boldsymbol{r}$ の方向の単位ベクトルである；しかしながら，この積は真正スカラーでなく擬スカラーである．

しかしながら，核子のエネルギーのそのスピンへの依存性は，粒子の速度に依存する相対論的な項を考慮するときあらわれる．これらのなかでは速度の1乗に比例する項がもっとも大きい．三つのベクトル $\boldsymbol{s}, \boldsymbol{n}$ および $\boldsymbol{v}$ から真正スカラー $[\boldsymbol{nv}]\boldsymbol{s}$ をつくることができる．したがって，核内核子の**スピン－軌道結合**の演算子は

$$\hat{V}_{sl} = -\varphi(r)[\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{v}}]\hat{\boldsymbol{s}} \tag{118.3}$$

の形になる；ここで $\varphi(r)$ は r のある関数である（576頁脚注参照）．$m_p[\boldsymbol{rv}]$ は粒子の軌道角運動量 $\hbar\hat{\boldsymbol{l}}$ であるから，式（118.3）はまた

$$\hat{V}_{sl} = -f(r)\hat{\boldsymbol{l}}\hat{\boldsymbol{s}} \tag{118.4}$$

の形に書ける；ここで $f = \hbar\varphi/rm_p$ である．この相互作用は v/c について1次であることを強調しよう．これに反し，原子内電子のスピン－軌道結合は v/c について2次の効果である（§72）．この違いは次のことからきている；核力は非相対論的近似ですでにスピンに依存するが，他方電子の非相対論的相互作用（クーロン力）はスピンには依存しない．

スピン－軌道相互作用エネルギーは主に核の表面近くに集まっている；すなわち，関数 $f(r)$ は核の内部では減衰する．実際に，無限の核物質ではこのような形の相互作用は一般に存在することができない．それはこのような系の一様性のために，そこではベクトル $\boldsymbol{n}$ を向けるべき特別な方向がまったく存在しないことからも明らかである．

相互作用（118.4）は，軌道角運動量 l をもつ核子の準位に対して，角運動量 $j = l \pm 1/2$ をもつ二つの準位への分裂をもたらす．（公式（31.3）に従って）

$$\begin{aligned} j &= l + \frac{1}{2} \text{ のとき} \qquad \boldsymbol{ls} = \frac{l}{2}, \\ j &= l - \frac{1}{2} \text{ のとき} \qquad \boldsymbol{ls} = -\frac{l+1}{2} \end{aligned} \tag{118.5}$$

であるから，この分裂の大きさは

$$\Delta E = E_{l-1/2} - E_{l+1/2} = \overline{f(r)}\left(l + \frac{1}{2}\right) \tag{118.6}$$

となる．実験の示すところでは，$j=l+1/2$ をもつ（ベクトル $\boldsymbol{l}$ と $\boldsymbol{s}$ とが平行な）準位は，$j=l-1/2$ をもつ準位よりも深いところにある；これは関数 $f(r)>0$ を意味している．

核内核子のスピン－軌道結合は，自己無撞着の場との相互作用に比べると比較的小さい．それと同時に，スピン－軌道結合は一般に，核内の２核子の直接の相互作用のエネルギーに比べると大きいことがわかる；それは後者の方が原子量の増大とともにより急速に減少する結果である．

種々の相互作用のエネルギーのあいだのこのような関係は次のような結果をもたらす；核準位の分類は jj–結合の型によって行なう必要がある：すなわち各核子のスピンと軌道角運動量は全角運動量 $\boldsymbol{j}=\boldsymbol{l}+\boldsymbol{s}$ に合成され，$\boldsymbol{l}$ と $\boldsymbol{s}$ とのあいだの結合は粒子どうしの直接の相互作用によってこわされないので，この全角運動量は確定値をもつ (M. Göppert–Mayer, 1949 ; O. Haxel, J.H. Jensen, H. E. Suess, 1949)[1]．各核子のベクトル $\boldsymbol{j}$ はその後で核の全角運動量 $\boldsymbol{J}$ に合成される（これはふつう，あたかも核が素粒子であるかのように，単に**核スピン**と呼ばれる）．こうした関係で，核準位の分類は原子準位の分類と本質的に異なっている：原子内の電子殻では，相対論的スピン－軌道結合は一般に，直接の電気的相互作用，および交換相互作用に比べて小さく，したがって，準位の分類はふつう LS–結合型に従って行なわれる．

核内の各核子の状態はその角運動量 j とその偶奇性により特徴づけられる．そのベクトル $\boldsymbol{l}$ および $\boldsymbol{s}$ のおのおのは個々には保存されないけれども，軌道角運動量の絶対値はそれにもかかわらず一定であることがわかる．実際に，角運動量 j は $l=j-1/2$ の状態からか，$l=j+1/2$ の状態からのどちらからもつくられ得る．j（半整数）の値が与えられたとき，これら二つの状態は異なる偶奇性 $(-1)^l$ をもっている；したがって j と偶奇性が与えられると，量子数 l が決定される．

同一の l および j をもつ核子の状態は，（エネルギーの大きくなる順序に従って）１から始まる整数値をとる《主量子数》$\boldsymbol{n}$ によって番号づけられるのがふつうである[2]．いろいろの状態は $1s_{1/2}$, $1p_{1/2}$, $1p_{3/2}$ 等の記号で書かれる；こ

1）非常に軽い核に対してのみ結合は LS–型の方に近い．

2）原子中の電子準位に用いられる条件とは違っている．原子では n は $l+1$ から始まる値をとる．

こで文字の前の数字は主量子数で，文字 $s, p, d, \cdots$ はふつうのように l の値を示し，文字についた添字は j の値である．n, l, j の値が与えられた状態には，$2j+1$ をこえない数の中性子と，それと同数の陽子とが同時に存在することができる．

（配位が与えられたときの）核全体の状態の特徴をあらわすには，J の値を与える数字に，その状態の偶奇性を示す $+$ あるいは $-$ の添字をつけた形に書くのがふつうである（状態の偶奇性は殻模型では，全核子の l の値の代数和が偶数か奇数かで決定される）．

原子核の性質に関する実験データの解析の結果，核準位の配列に一連の法則性を確立することが可能であることがわかった．

とくに，核子のエネルギー準位は軌道角運動量 l とともに増大することがわかった．この規則は，l の増大とともに粒子の遠心力が増大し，したがってその結合エネルギーが減少することと関連している．

さらに，l の値が与えられたとき，$j=l+1/2$ をもつ（すなわち平行なベクトル $\mathbf{l}$ と $\mathbf{s}$ に対応する）準位は $j=l-1/2$ をもつ準位よりも深いところにある．この規則は核内核子のスピン－軌道結合の性質に関連して，前にすでに触れてある．

つぎの規則は核のアイソスピンに関するものである．アイソスピンの投影 T_ζ はすでに核の原子量と原子番号によって決定されることを思い起こそう（(116.1) 参照）．T_ζ の値が与えられたとき，アイソスピンの絶対値は，不等式 $T \geqq |T_\zeta|$ を満足する任意の値をもち得る．ふつう，核の基底状態はアイソスピンのこれらの許される値のうちの最小値をとる：すなわち

$$T_{\text{gr}} = |T_\zeta| = \frac{1}{2}(N-Z). \tag{118.7}$$

この規則は，中性子と陽子の相互作用の特質，すなわち，np 系ではアイソスピン $T=0$ をもつ状態（重陽子の状態）が $T=1$ をもつ状態よりも結合エネルギーが大きい（576ページ脚注参照）ことからきている．

また核の基底状態のスピンに関するいくつかの規則を定式化することもできる．これらの規則は，個々の核子の角運動量 $\boldsymbol{j}$ がどのように核の全スピンに合成されるかを決定する．核内で同一状態にある陽子や中性子が，逆向きの角運

動量をもつ（pp および nn の形の）《対形成》をしようとする傾向にあらわれている（これらの対の結合エネルギーは 1–2 MeV の大きさの量になる）.

この現象は，たとえば次の結果を導くことになる；もしも核が陽子も中性子も偶数個を含めば（**偶－偶**核），全核子の角運動量は対ごとに打ち消しあい，その結果核の全角運動量はゼロになる.

ところがもしも核が奇数個の陽子あるいは中性子をもち，このとき閉殻の外のすべての核子が同じ状態にあれば，ふつう，核の全角運動量は1個の核子の角運動量に一致する；それはすべての可能な陽子対および中性子対について《対形成》したのち，打ち消しあわない角運動量をもつ一つの核子が残るからである（閉殻の全角運動量は自動的にゼロになる）.

奇－奇核（Z と N が奇数）は基底状態のスピンを決定する，十分に一般的な規則は存在しない.

核内の殻のうめ方の具体的な様子の考察は，存在する実験データの詳細な解析を要求するであろうし，この本の枠外に出る．ここではただ一般的な注意だけに限ることにしよう.

原子の性質の研究の際に，われわれはその電子状態をいくつかの群に分けることができた；それは，その群を満たして次の群に移るときに電子結合エネルギーが減少するようなものであった．同様な事情が核の場合にも存在し，核子の状態は次のような群に分けられる：

$$
\begin{array}{ll}
1s_{1/2} & 2\ \text{核子} \\
1p_{3/2},\ 1p_{1/2} & 6\ \text{核子} \\
1d_{5/2},\ 1d_{3/2},\ 2s_{1/2} & 12\ \text{核子} \\
1f_{7/2},\ 2p_{3/2},\ 1f_{5/2},\ 2p_{1/2},\ 1g_{9/2} & 30\ \text{核子} \\
2d_{5/2},\ 1g_{7/2},\ 1h_{11/2},\ 2d_{3/2},\ 3s_{1/2} & 32\ \text{核子} \\
2f_{7/2},\ 1h_{9/2},\ 1i_{13/2},\ 2f_{5/2},\ 3p_{3/2},\ 3p_{1/2} & 44\ \text{核子}
\end{array}
\qquad (118.8)
$$

各群に対して，陽子あるいは中性子の席の総数が示してある．したがって，これらの数のときに，群の中のどちらかの充塡が完了する；このとき，核内の陽子の総数 Z あるいは中性子の総数 N は次の数のうちのどちらか一つに等しい：

$$2,\quad 8,\quad 20,\quad 50,\quad 82,\quad 126.$$

これらの数はふつう**魔法数**[1]と呼ばれる．

Z も N も魔法数であるような **二重魔法数** の核と呼ばれる核は特別な安定性をもっている．これに近い核と比べて，二重魔法数の核はつぎの一つの核子に対して異常に小さい親和力をもっている．またその第1励起準位は異常に高い[2]．

(118.8) の群おのおののなかの種々の状態は，大体において一連の核で次々と充塡される順序に列挙されている．しかしながら，実際にはこの充塡の仕方にはかなりの不規則性が見られる．そのほか，（魔法数から離れた）重い核では異なる準位間の間隔が《対形成エネルギー》と同程度であり得ることも考えに入れる必要がある；これらの条件の下では，対の成分の個別の状態の概念自身が，かなりの程度意味を失ってしまうからである．

殻模型での核の磁気モーメントの計算に関する若干の注意をしよう．核の磁気モーメントというとき，われわれは当然，核内の粒子の運動について平均された磁気モーメントであると考える．この平均磁気モーメント $\bar{\boldsymbol{\mu}}$ は明らかに核スピン $\boldsymbol{J}$ の方向を向いている；それはこの方向が核内の唯一の特別な方向だからである；したがって，その演算子は

$$\overline{\hat{\boldsymbol{\mu}}}=\mu_0 g\hat{\boldsymbol{J}} \tag{118.9}$$

である．ここで μ_0 は核磁子で，g は g 因子である．このモーメントの投影の固有値は $\bar{\mu}_z=\mu_0 g M_J$ である．ふつう（(111.1) 参照）核の磁気モーメント μ は，単にその投影の最大値，すなわち $\mu=\mu_0 g J$ のことと考える；このようにおくと

$$\overline{\hat{\boldsymbol{\mu}}}=\mu\frac{\hat{\boldsymbol{J}}}{J} \tag{118.10}$$

となる．

核の磁気モーメントは，閉殻外にある核子の磁気モーメントから合成される；閉殻内の核子のモーメントは互いに打ち消しあうからである．各核子は核内で，二つの部分から重ね合わされた磁気モーメントをつくる：これらはスピン性のもの，および（陽子の場合には）軌道性のものである．すなわち，和

---

1) 8個の席をもった $1f_{7/2}$ 状態はそれ自身一つの群として分けられることがある，これは28という数が魔法数の性質をある程度持っているからである．

2) これらは ${}^{4}_{2}\mathrm{He}_2$，${}^{16}_{8}\mathrm{O}_8$，${}^{40}_{20}\mathrm{Ca}_{20}$，${}^{208}_{82}\mathrm{Pb}_{126}$ 等である．${}^{4}\mathrm{He}$ 核はさらに1個の核子をつけることはけっしてできない．

$$g_s\hat{\boldsymbol{s}}+g_l\hat{\boldsymbol{l}}$$

であらわされる．（この式以後は因子 μ_0 を落とそう．それはふつう行なわれるように，磁気モーメントは核磁子を単位として測られることを暗に了解してのことである）．軌道性およびスピン性 g 因子は次の値に等しい：すなわち，陽子に対しては $g_l=1$，$g_s=5.585$ で，中性子に対しては $g_l=0$，$g_s=-3.826$ である．

核内核子の運動について平均したあと，その磁気モーメントは $\boldsymbol{j}$ に比例する；これを $g_j\boldsymbol{j}$ の形に書いて，

$$g_j\hat{\boldsymbol{j}}=g_s\overline{\hat{\boldsymbol{s}}}+g_l\overline{\hat{\boldsymbol{l}}}=\frac{1}{2}(g_l+g_s)\hat{\boldsymbol{j}}+\frac{1}{2}(g_l-g_s)\overline{(\hat{\boldsymbol{l}}-\hat{\boldsymbol{s}})}$$

を得る．この等式の両辺に $\hat{\boldsymbol{j}}=\hat{\boldsymbol{l}}+\hat{\boldsymbol{s}}$ を掛け，固有値にかえて

$$g_jj(j+1)=\frac{1}{2}(g_l+g_s)j(j+1)+\frac{1}{2}(g_l-g_s)[l(l+1)-s(s+1)]$$

を得る．ここで $s=1/2$，$j=l\pm1/2$ を代入して

$$j=l\pm\frac{1}{2}\ \text{のとき}\qquad g_j=g_l\pm\frac{g_s-g_l}{2l+1} \tag{118.11}$$

となる．前記の g 因子を使って，これは陽子の磁気モーメント $\mu_p=g_jj$ に対し

$$\left.\begin{aligned} j=l-\frac{1}{2}\ \text{のとき}\qquad &\mu_p=\left(1-\frac{2.29}{j+1}\right)j,\\ j=l+\frac{1}{2}\ \text{のとき}\qquad &\mu_p=j+2.29 \end{aligned}\right\} \tag{118.12}$$

を与える．中性子の磁気モーメントに対しては

$$\left.\begin{aligned} j=l-\frac{1}{2}\ \text{のとき}\qquad &\mu_n=\frac{1.91}{j+1}j,\\ j=l+\frac{1}{2}\ \text{のとき}\qquad &\mu_n=-1.91 \end{aligned}\right\} \tag{118.13}$$

を与える (T. Schmidt, 1937).

もしも閉殻の外にただ一つの核子があるとき，公式 (118.12) あるいは (118.13) は直接に核の磁気モーメントを与える．2核子に対してはそれらの磁気モーメントの合成は，同様に初等的に行なわれる（問題1参照）．核子数が大きい場合には，磁気モーメントの平均は，核子の個々の波動関数から適当な方法で組み立てられた，系の波動関数を使って行なう必要がある．核子の配位と核

全体の状態が与えられると，与えられた J および T の値に対して与えられた配位がただ一つの状態に対応する場合には，系の波動関数を一意的に組み立てることが可能である（たとえば問題３参照）；そうでない場合には，核の状態は（同一の J, T をもつ）いくつかの独立な状態の《混合》状態になる．そして一般に，核の波動関数を与える１次結合の係数が未定のままになる[1]．

最後に，核内核子にスピン－軌道結合が存在することは，核内陽子に（(118.9) に対し）付加的な磁気モーメントの出現をもたらすことを示そう（M. Göppert-Mayer, J. H. Jensen, 1952）．それは次のようなことである；相互作用演算子が粒子速度にあらわに依存すると，外場の存在する場合への移行は，運動量の演算子を $\hat{\boldsymbol{p}}\to\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}$ に従って置きかえれば実現される．(118.3) にこの置きかえを行ない，ベクトル・ポテンシャルに対して式 (111.7) を使って，陽子のハミルトニアン中に付加項

$$\varphi(r)\frac{e}{cm_p}[\boldsymbol{n}\boldsymbol{A}]\hat{\boldsymbol{s}}=f(r)\frac{e}{2c\hbar}[\boldsymbol{r}[\boldsymbol{H}\boldsymbol{r}]]\hat{\boldsymbol{s}}=f(r)\frac{e}{2c\hbar}[\boldsymbol{r}[\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{r}]]\boldsymbol{H}$$

があらわれることがわかる．このような項は，演算子

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_{\mathrm{add}}=-\frac{e}{2c\hbar}f(r)[\boldsymbol{r}[\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{r}]]=-\frac{e}{2c\hbar}r^2f(r)\{\hat{\boldsymbol{s}}-(\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{n})\boldsymbol{n}\} \qquad (118.14)$$

をもつ付加的な磁気モーメントが生ずることと同等である．

問　　題

1.　（全角運動量 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{j}_1+\boldsymbol{j}_2$ をもつ）２核子系の磁気モーメントを求め，それを各核子の磁気モーメント μ_1 および μ_2 を使ってあらわせ．

解　公式 (118.11) の導き方と同様にして

$$\frac{\mu}{J}=\frac{1}{2}\left(\frac{\mu_1}{j_1}+\frac{\mu_2}{j_2}\right)+\frac{1}{2}\left(\frac{\mu_1}{j_1}-\frac{\mu_2}{j_2}\right)\frac{(j_1-j_2)(j_1+j_2+1)}{J(J+1)}$$

を得る．

2.　角運動量 $j=3/2$（および同一の主量子数）をもつ３核子系の可能な状態を見いだせ．

解　§67 の同等な電子の系の可能な状態を見いだすときと同様に行なう．各核子は量子数 (m_j, τ_ζ) の次のような値の対をもつ８つの状態のうちの一つに存在し得る．

---

1)　しかしながら，《１粒子の》枠組の計算の精度では，核の磁気モーメントは大きくないことが知られている．(118.12) と (118.13) の値の対は，正確なモーメントの値よりも，いくぶん高すぎる上限，および低すぎる下限であることが知れている．

$$(3/2,\ \ 1/2),\ (1/2,\ \ 1/2),\ (-1/2,\ \ 1/2),\ (-3/2,\ \ 1/2),$$
$$(3/2, -1/2),\ (1/2, -1/2),\ (-1/2, -1/2),\ (-3/2, -1/2).$$

これらの状態のうち三つずつ異なるものを結合すると，3核子系に対し次のような量子数の対 $(M_J,\ T_\zeta)$ を見いだす．

$$(7/2, 1/2),\quad 2(5/2, 1/2),\quad (3/2, 3/2),\quad 4(3/2, 1/2),\quad (1/2, 3/2),\quad 5(1/2, 1/2)$$

(括弧の前の数値は対応する状態の数である；M_J, T_ζ の負の値の状態は書かなくてもよい)．量子数 (J, T) の次のような値の系の状態がこれらに対応することができる：

$$(7/2, 1/2),\quad (5/2, 1/2),\quad (3/2, 3/2),\quad (3/2, 1/2),\quad (1/2, 1/2).$$

3. 中性子2個と陽子1個が(同一の n の) $p_{3/2}$ 状態にある配位の基底状態の磁気モーメントを，アイソ不変性を考慮して決定せよ[1]．

解 このような配位の基底状態は $J=3/2$ をもち，本文に示した規則に従って，そのアイソスピンは可能な最小値 $T=|T_\zeta|=1/2$ をもっている．

可能な最大値 $M_J=3/2$ に対応する系の波動関数を決定しよう．M_J のこの値は（2個の同一粒子に対するパウリ原理の要求を考慮して)，核子 p, n, n にそれぞれ対応して次のような3個の m_j 値の組によって実現される：

$$(3/2, 3/2, -3/2),\quad (3/2, 1/2, -1/2),\quad (1/2, 3/2, -1/2),\quad (-1/2, 3/2, 1/2).$$

したがって，求める波動関数 $\psi^{JM_J}_{TT_\zeta}$ は次の形の1次結合になる：

$$\Psi^{3/2\ \ 3/2}_{1/2\,-1/2}=a[\psi^{3/2}_{1/2}\psi^{\ 3/2}_{-1/2}\psi^{-3/2}_{-1/2}]+b[\psi^{3/2}_{1/2}\psi^{\ 1/2}_{-1/2}\psi^{-1/2}_{-1/2}]$$
$$+c[\psi^{\ 3/2}_{-1/2}\psi^{1/2}_{1/2}\psi^{-1/2}_{-1/2}]+d[\psi^{\ 3/2}_{-1/2}\psi^{\ 1/2}_{-1/2}\psi^{-1/2}_{1/2}]. \tag{1}$$

ここで [⋯] は核子の1体の波動関数 $\psi^{m_j}_{\tau_\zeta}$ の規格化された反対称積をあらわす（すなわち，(61.2) の形の行列式である)．

関数 (1) に演算子

$$\hat{T}_-=\sum_{i=1}^{3}\hat{\tau}_-^{(i)}\quad および\quad \hat{J}_+=\sum_{i=1}^{3}\hat{j}_+^{(i)}$$

を作用させるとゼロにならなければならない (§67 の問題参照)．演算子 $\hat{\tau}_-^{(i)}$ は i 番目の核子について陽子の波動関数を中性子のそれにかえる（そして中性子の波動関数をゼロにする)．したがって容易にわかるように，演算子 $\hat{T}_-$ は，(1) の第1項を，二つの同じ行をもった行列式にかえる，すなわちゼロにする；残りの3項の行列式は同じままで残る；したがって条件

$$b+c+d=0$$

を得る．さらに角運動量 $j=3/2$ といろいろな値の m_j をもつ各核子に対し ((27.12) に従って)

$$\hat{j}_+\psi^{3/2}=0,\quad \hat{j}_+\psi^{1/2}=\sqrt{3}\,\psi^{3/2},\quad \hat{j}_+\psi^{-1/2}=2\psi^{1/2},\quad \hat{j}_+\psi^{-3/2}=\sqrt{3}\,\psi^{-1/2}.$$

これから演算子 $\hat{J}_+$ を関数 (1) に作用させるとき，次のようになることが容易にわかる：

---

1) Li^7 核が（閉殻 $(1s_{1/2})^4$ の外側に）このような配位をもっている．

$$\hat{J}_+\Psi^{3/2\ 3/2}_{1/2\ -1/2}=\sqrt{3}(a+b-c)[\psi^{3/2}_{1/2}\psi^{\ 3/2}_{-1/2}\psi^{-1/2}_{-1/2}]+2(c-d)[\psi^{\ 3/2}_{-1/2}\psi^{1/2}_{1/2}\psi^{\ 1/2}_{-1/2}]$$

(いくつかの項での符号の変化は，行列式の行の交換によるものである)． この式がゼロに等しい条件から

$$a+b-c=0, \qquad c-d=0.$$

関数 (1) の規格化の条件といっしょにして，得られた式は

$$a=\frac{3}{\sqrt{15}}, \qquad b=-\frac{2}{\sqrt{15}}, \qquad c=d=\frac{1}{\sqrt{15}}$$

を与える．

m_j が与えられた状態にある陽子 (あるいは中性子) の磁気モーメントの投影の平均値は $\mu_p m_j/j$ (あるいは $\mu_n m_j/j$) であることを考慮すると，波動関数 (1) を使って計算された系の磁気モーメントの平均値は

$$\mu=\bar{\mu}_z=\frac{9}{15}\mu_p+\frac{4}{15}\mu_p+\frac{1}{15}\left(\frac{1}{3}\mu_p+\frac{2}{3}\mu_n\right)+\frac{1}{15}\left(-\frac{1}{3}\mu_p+\frac{4}{3}\mu_n\right)=\frac{1}{15}(13\mu_p+2\mu_n)$$

に等しいことがわかる．公式 (118.12)，(118.13) に従って，$p_{3/2}$ 状態の核子に対して，$\mu_n=-1.91$，$\mu_p=3.79$ であることがわかる．その結果 $\mu=3.03$ である．

4. 閉殻外のすべての核子が同じ状態にあり， 陽子数と中性子数が等しい核の磁気モーメントを求めよ．

解 $N=Z$ のときにアイソスピンの投影 $T_\zeta=0$ であるから，演算子

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}=\sum_n g_n\hat{\boldsymbol{j}}_n+\sum_p g_p\hat{\boldsymbol{j}}_p$$

のアイソスカラーの部分だけが対角要素をもっている (§116 末尾参照)．公式 (116.5) に従ってその部分を分けると，それが

$$\frac{1}{2}(g_n+g_p)\sum_{n,p}\hat{\boldsymbol{j}}=\frac{1}{2}(g_n+g_p)\hat{\boldsymbol{J}}$$

に等しいことがわかる． したがって， 核の全磁気モーメントの平均は $\frac{1}{2}(g_n+g_p)J$ に等しい．

5. 角運動量 $\boldsymbol{j}$ をもつ核子の磁気的双極モーメントを計算し， スピン－軌道分裂の大きさ (118.6) を使ってそれをあらわせ (M. Göppert-Mayer, J. H. Jensen, 1952)．

解 演算子 (118.14) の角部分 ((118.14) のなかの波括弧のなかの式である．これを $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ としよう) の平均は，§29，問題で得られた公式を使って行なわれ，

$$\bar{\hat{\boldsymbol{\sigma}}}\equiv\overline{\hat{\boldsymbol{s}}-(\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{n})\boldsymbol{n}}=\frac{2}{3}\hat{\boldsymbol{s}}+\frac{(\hat{\boldsymbol{s}}\hat{\boldsymbol{l}})\hat{\boldsymbol{l}}+\hat{\boldsymbol{l}}(\hat{\boldsymbol{s}}\hat{\boldsymbol{l}})-\frac{2}{3}l(l+1)\hat{\boldsymbol{s}}}{(2l-1)(2l+3)} \tag{2}$$

を与える． 他方， 核子の運動について平均した後，$\boldsymbol{\sigma}$ の平均値は $\boldsymbol{j}$ の方向だけを向くことができる； すなわち $\bar{\hat{\boldsymbol{\sigma}}}=a\hat{\boldsymbol{j}}$ である； これから $a=(\bar{\hat{\boldsymbol{\sigma}}}\hat{\boldsymbol{j}})/\boldsymbol{j}^2$ である． ベクトル (2) の $\boldsymbol{j}$ への投影を行ない (このとき，演算子 $\hat{\boldsymbol{j}}$ が $(\hat{\boldsymbol{l}}\hat{\boldsymbol{s}})$ と交換することを考慮する必要がある)，$\boldsymbol{ls}$, $\boldsymbol{l}^2$ およびその他の量を固有値に移し， 簡単な計算の後に核子の付加的な磁気モーメントに対する次のような式を (核磁子の単位で) 得る：

$$j=l\pm\frac{1}{2} \text{ のとき} \qquad \mu_{\mathrm{add}}=\mp\overline{f(r)}\frac{m_pR^2}{\hbar^2}\frac{2j+1}{4(j+1)} \tag{3}$$

(m_p は核子の質量，R は核半径である；r^2f の平均をとるとき，$f(r)$ が核内部で急激に減少するために，因子 r^2 は R^2 にかえられた)．(3) のなかの平均値 $\overline{f}$ は (118.6) に従って，スピン－軌道分裂を使ってあらわされる．

§ 119. 非 球 形 核

球対称の場の中を運動する粒子系は，回転のエネルギー・スペクトルをもつことはできない；量子力学ではこのような系に対して回転の概念はいかなる意味をもち得ない．これは前節で考察された，球対称な自己無撞着の場を使った核の殻模型についてもいえることである．

系のエネルギーを内部および回転部分に分けることは，量子力学では一般に厳密な意味はもたない．それは近似的意味だけをもつことができ，それも何らかの物理的原因で，球対称をもたない与えられた場の中を運動する粒子の集まりと，系をみなすことがよい近似である場合に可能である．準位の回転構造があらわれるのは，上記の場が固定した座標系に関して回転する可能性を考慮に入れた結果である．われわれは，たとえば分子でこのような場合を扱った；分子の電子項は，固定した核の与えられた場の中を運動する電子系のエネルギー準位として決定される．

実験の示すところでは，大部分の核は実際には回転構造をもたない．それは，球対称の自己無撞着の場がそれらに対してよい近似であること，すなわち核は（量子論的変動を除いた精度で）球形をしていることを意味している．

しかしながら，回転型のエネルギー・スペクトルをもつような種類の核が存在する（これは原子量が大体 $150<A<190$ および $A>220$ の区間の核に関することである)．これらに対しては球対称の自己無撞着の場の近似が全く不適当であることをその性質が示している．これらの核に対する自己無撞着の場は，原則的にはその対称性に対する何らの先入的な仮定なしに求める必要があり，そのとき，核の形もまた《自己撞着のないように》決められる．実験の示すところでは，これらの種類の核の正しい模型は，対称軸をもち，その軸に垂直な面に対しても対称な（すなわち，回転楕円体の対称性をもつ）自己無撞着の場をもっている．非球形核の考えはボーアおよびモッテルソンによってもっとも

完全に研究された（A. Bohr, B. R. Mottelson, 1952–1953）.

われわれは二つの質的に異なった種類の核を扱っていることを強調しよう．それは，核が球形であるか，あるいはけっして小さくない《非球形度》をもつ非球形であるかのどちらかであることに特にあらわれている．

非球形が生ずるのは核内に閉じない殻が存在することが原因になっている；この現象には，もちろん，また核子の対形成の現象が重要な役割を演じている．逆に殻を閉じることは核が球形になることの原因である．この意味で二重魔法数の核 $^{208}_{82}$Pb は特徴的である；この核子配位がもっている鋭い閉殻性のために，この核（およびこれに近い核）は球形であり，したがって一連の重い非球形核のなかに断層があらわれることになる．

非球形核のエネルギー準位は，二つの部分の和であらわされる：《静止》核の準位と核全体としての回転エネルギーとである．たまたま偶々核では準位の回転構造の間隔は，《静止》核の準位間の間隔に比べて小さい．

非球形核の準位の分類は，（同一原子からなる）2原子分子の準位の分類と多くの点で類似している．なぜかというと，粒子（核子あるいは電子）が運動する場の対称性が，両方の場合に同じだからである．したがって，われわれは第11章で得られた一連の結果をそのまま利用できる[1]．

始めに《静止核》の状態の分類を行なおう．軸対称の場の中では，角運動量の対称軸への投影のみが保存される．したがって，核の各状態は，まず第一に，全角運動量の投影の大きさ Ω によって特徴づけられる[2]；Ω は整数にも半整数にもなり得る．すべての核子の（核の中心に対する）座標の符号の変更に対する波動関数の振舞いによって，準位は偶 (g) および奇 (u) に分けられる．

このほか $\Omega=0$ のときは，核の軸を通る面での鏡映に対する波動関数の振舞

1）対称とまでなく，まさに2原子分子の準位の分類との類似性に言及しているのであることを強調しよう．軸対称場の中で運動する粒子系に対しては，場の軸のまわりの回転の概念は意味を持たない．これは中心対称場の中の系に対して，任意の軸のまわりの回転の概念が意味を持たないのと同様である．

2）定義から $\Omega\geq 0$ である（2原子分子で量子数 Λ が正であるのと同様である）．2原子分子の場合に量子数 Ω の負の値が起こるわけは，Ω が和 $\Lambda+\Sigma$ として定義され，ここで Σ は（軌道角運動量とスピンの相対的な向きに依存して）正にも負にもなり得るためであることを思い起こそう．

いによって，さらに付加的に正と負の状態が区別される（§78参照）．

偶－偶の非球形核の基底状態は 0_g^+ 状態である（数字は Ω の値を示す）；これはゼロに等しい角運動量と波動関数のもっとも高い対称性とに対応する；この状況はすべての中性子とすべての陽子とがそれぞれ対ごとの対形成をする結果である．ところがもしも核が奇数個の陽子あるいは中性子を含めば，そこでは《奇数番目の》核子の状態は，核の偶－偶の《芯》の自己無撞着の場のなかで考察することができる．

このとき Ω の値は，この核子の角運動量の投影 ω によって決定される．同様に奇－奇核では Ω の値は，奇数番目の中性子と奇数番目の陽子の角運動量の投影から合成される（$\Omega=|\omega_p\pm\omega_n|$）．

同時に次のことを強調しなければならない；つまり，核子の軌道角運動量とスピンの投影の確定値について云々してはいけないということである．それは次のようなわけである；核子のスピン－軌道結合は，核子と芯の自己無撞着の場との相互作用のエネルギーに比べると小さいけれども，この場のなかの核子の隣りどうしのエネルギー準位間の間隔に比べては小さくない．とくにこの最後の条件こそが，核子の軌道角運動量とスピンとを別々によい近似で考察するのを許す摂動論の適用可能性のために要求されるものである[1]．

非球形核の準位の回転構造に移ろう．この構造の間隔は，核内核子のスピン－軌道相互作用に比べて小さい；このような事情は2原子分子の理論の a の場合に対応する（§83）．

回転する核の全角運動量 $\boldsymbol{J}$ はもちろん保存される．Ω が与えられたとき，J の値は，Ω から始まる値

$$J=\Omega,\quad \Omega+1,\quad \Omega+2,\cdots \tag{119.1}$$

をとる（(83.2)参照）．J の可能な値に対する付加的な制限は $\Omega=0$ の核に起こる：状態 0_g^+ および 0_u^- では量子数 J は偶数値のみ，また状態 0_g^- および 0_u^+ では奇数値のみをとる（§86参照）．とくに，偶－偶核の基底項（0_g^+）の回転準位では，量子数 J は $0, 2, 4, \cdots$ の値をとる．

核の回転エネルギーは公式

1）球形核では，しかしながら，偶奇性と角運動量の保存則をいっしょに適用する結果，これが可能なことがわかっている．

$$E_{\mathrm{rot}}=\frac{\hbar^2}{2I}J(J+1) \tag{119.2}$$

で与えられる；ここで I は（対称軸に垂直な軸に関する）慣性モーメントである；この公式は2原子分子の理論の類似の（(83.6) の中の J に依存する）式に対応する．最低準位は J の可能な最小値，すなわち $J=\Omega$ に対応する．

(119.2) により，準位の回転構造は（Ω が与えられたとき）準位の他の性質に依存しない一定の間隔則によって特徴づけられる．たとえば，偶－偶核の基底項の（$J=2, 4, 6, 8, \cdots$ をもつ）回転構造の成分は，もっとも深い準位（$J=0$）から，$1:3.3:7:12:\cdots$ の比の距離に位置している．

奇数個の核子をもつ核に起こる $\Omega=1/2$ をもつ状態に対しては，公式(119.2) は不十分である．この場合には，奇数番目の核子と回転核の遠心力場との相互作用から，エネルギーに (119.2) と同程度の寄与が生ずる．これの J への依存性は次のようにして見いだされる．

力学で知られているように（第Ⅰ巻『力学』§39参照），回転座標系の粒子のエネルギーは，回転の角速度と粒子の角運動量との積に等しい付加項を含んでいる．核のハミルトニアンの中の対応する項は $2b\hat{\boldsymbol{K}}\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ の形にあらわされる；ここで b はある定数，$\hat{\boldsymbol{K}}$ は核の芯（最後の核子を除いた核）の回転の角運動量，そして $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ は核子の角運動量である．後者は純形式的な意味で，スピン1/2の演算子と同様に，$\Omega=1/2$ の値に対応して角運動量の投影 $\pm1/2$ をもつ状態間の遷移を与える演算子であると理解する必要がある[1]（実際に，核の軸対称場では核子の角運動量ベクトルは存在しない）．$\boldsymbol{K}=\boldsymbol{J}-\boldsymbol{\sigma}$ であるから，上記の演算子の固有値は

$$2b\boldsymbol{K}\boldsymbol{\sigma}=b\left[J(J+1)-K(K+1)-\frac{3}{4}\right]$$

である．ここで便宜上 J に依存しない定数 $b/2$ を付け加えて，$J=K\pm1/2$ のときにこの量が $\pm b(J+1/2)$ に等しいことがわかる．

もしも，芯（これは偶－偶核である）の角運動量 K が偶数であることを考慮

1) $\Omega=1/2$ の場合の特殊性は次のようにまとめられる；角運動量の投影の符号だけが異なり，同じエネルギーに属する状態間の遷移に対する，摂動エネルギーの行列要素が存在することである．これは，1次の摂動論ですでにエネルギーのずれを出現させることになる．
いま考えている現象は，$\Omega=1/2$ をもつ2原子分子の準位の Λ－2重項に似ている（§88）.

すれば，この式は $(-1)^{J-1/2}b(J+1/2)$ の形に書くことができる．このようにして，$\Omega=1/2$ をもつ核の回転エネルギーに対して次のような式を得る：

$$E_{\rm rot}=\frac{\hbar^2}{2I}J(J+1)+(-1)^{J-1/2}b\left(J+\frac{1}{2}\right) \qquad (119.3)$$

(A. Bohr, B. Mottelson, 1953)．もしも b が正で十分に大きければ，$J=3/2$ をもつ準位は $J=1/2$ をもつ準位より低くなること，すなわち回転準位の正規な順序が破られることを指摘しておこう．正規な順序とは，最低準位が J の可能な最小値に対応するものである．

非球形核の慣性モーメントを，与えられた形の剛体の慣性モーメントとして計算することはできない．もしも核の自己無撞着の場で運動する核子が直接には互いに相互作用をしないとみなし得るならば，そのときにのみこのような計算は可能であろう．しかしながら実際には，対形成の現象が慣性モーメントを，剛体に対応する値に比べて小さくしている．

非球形核の磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}$ は，《静止》核の磁気モーメントと，核の回転による磁気モーメントとから合成される．前者は（核内核子の運動について平均した後）核の軸の方向に向く；これの大きさを μ'，核の軸に沿った単位ベクトルを $\boldsymbol{n}$ とおき，これを $\mu'\boldsymbol{n}$ の形に書く．ところが回転による磁気モーメントは（同じ平均をした後）ベクトル $\boldsymbol{J}-\Omega\boldsymbol{n}$ の方向を向く．これは核の全角運動量から《静止核》のなかの核子の角運動量を引き去ったものである[1]．このようにして

$$\boldsymbol{\mu}=\mu'\boldsymbol{n}+g_r(\boldsymbol{J}-\Omega\boldsymbol{n}). \qquad (119.4)$$

ここで g_r は核の回転の g 因子である．回転のときの磁気モーメントへの寄与は陽子だけが与えるので，

$$g_r=\frac{I_p}{I_p+I_n} \qquad (119.5)$$

である．ここで I_n および I_p は，核の慣性モーメントの中性子および陽子の部分である（陽子1個だけの系に対しては単に $g_r=1$ でなければならない）．比 (119.5) は一般に陽子数と核の全質量との比 Z/A には一致しない．

核の回転について平均した後，磁気モーメントは保存されるベクトル $\boldsymbol{J}$ の方

1) このような書き方は，$\Omega\neq1/2$ のときにのみ適用できる（問題2参照）．

向を向き，

$$\bar{\hat{\boldsymbol{\mu}}}=\frac{\mu}{J}\hat{\boldsymbol{J}}=(\mu'-\Omega g_r)\bar{\boldsymbol{n}}+g_r\hat{\boldsymbol{J}}$$

となる．ふつう行なうように，この等式の両辺に $\hat{\boldsymbol{J}}$ をかけ，固有値をとる．核の基底状態では $\Omega=J$ であり，結果として

$$\mu=(\mu'+g_r)\frac{J}{J+1} \tag{119.6}$$

を得る．

問　　題

1.　回転する核の4重極モーメント Q を，核に固定した軸に関する4重極モーメント Q_0 を使ってあらわせ（A. Bohr, 1951）．

解　回転核の4重極モーメントのテンソル演算子は，Q_0 を使って

$$Q_{ik}=\frac{3}{2}Q_0\left(n_i n_k-\frac{1}{3}\delta_{ik}\right)$$

によってあらわされる．これは跡がゼロに等しい対称テンソルで，核の軸方向の単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ の成分からつくられ，$Q_{zz}=Q_0$ である．核の回転状態についての平均は，§29の問題の解と同様に行なわれる（それとの違いは $n_i\hat{J}_i=\Omega$ であって，ゼロでないことである）．その結果

$$Q=Q_0\frac{3\Omega^2-J(J+1)}{(2J+3)(J+1)}$$

とした（75.2）の形の式をもたらす．

$\Omega=J$ の核の基底状態に対して

$$Q=Q_0\frac{(2J-1)J}{(2J+3)(J+1)}$$

を得る．J が大きくなると Q/Q_0 の比は1に近づくが，非常にゆっくりとである．

2.　$\Omega=1/2$ の核の基底状態の磁気モーメントを求めよ．

解　この場合，磁気モーメントの演算子は，本文で導入された演算子 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ を使って

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}=2\mu'\hat{\boldsymbol{\sigma}}+g_r\hat{\boldsymbol{K}},\qquad \hat{\boldsymbol{K}}=\hat{\boldsymbol{J}}-\hat{\boldsymbol{\sigma}}$$

の形にあらわされる．これから先の計算は本文と同様に行なわれる．もしも核の基底状態が $J=1/2$ の値（ここで量子数 $K=J-1/2=0$ である）に対応すれば，$\mu=\mu'$ が得られる．ところが，もしも基底状態で $J=3/2$（ここで $K=J+1/2=2$ である）ならば，$\mu=\frac{9}{5}g_r-\frac{3}{5}\mu'$ である．

3.　3軸楕円体の対称性をもつ偶－偶核の基底状態の回転構造の準位，最初のいくつかのエネルギーを求めよ．

解　偶－偶核の基底状態は，対称性が最大である《静止》核の波動関数，すなわち $\boldsymbol{D}_2$

群の表現 A に対応する対称性の関数に対応する．したがって，J の値が与えられたとき，（J が偶数のとき）合計 $J/2+1$ 個あるいは（J が奇数のとき）$(J-1)/2$ 個の異なる準位がある．これらの準位は，$J=2$ に対しては§103の問題で得られた公式 (7) で与えられ，$J=3$ に対しては公式 (8) で与えられる．

§ 120. アイソトープ・シフト

核特有の性質（有限の質量，半径，スピン）は，クーロン場の静止した点中心とは異なるので，原子の電子エネルギー準位に一定の影響を与える．

いわゆる準位の**アイソトープ・シフト**——与えられた元素の一つの同位体から他の同位体に移るときのエネルギー準位の変化——はこのような効果の一つである．実際には，一つの準位のエネルギーの変化でなく，スペクトル線の形で観測される二つの準位の差の変化が重要なわけである．このようなわけで実際には，原子の電子殻全体のエネルギーでなく，与えられたスペクトルの遷移にあずかる電子に関する部分だけを考察すればよい．

軽い原子では，核の質量の有限性がアイソトープ・シフトの主な原因である．核の運動を考慮すると，原子のハミルトニアン中に次の項があらわれる：

$$\frac{1}{2M}\Big(\sum_i \hat{\boldsymbol{p}}_i\Big)^2.$$

ここで M は核の質量で，$\boldsymbol{p}_i$ は電子の運動量である[1]．したがって，この効果によるアイソトープ・シフトは原子の与えられた状態の波動関数によって計算された平均値

$$\frac{1}{2}\left(\frac{1}{M_1}-\frac{1}{M_2}\right)\overline{\Big(\sum_i \boldsymbol{p}_i\Big)^2} \tag{120.1}$$

で与えられる（M_1, M_2 は同位体の核の質量である）．

重い原子核では，アイソトープ・シフトへの主な寄与は核の大きさと結びついている．この効果は実際には，s 状態にある外殻電子にのみ認められる．なぜかというと，s 状態にある電子の波動関数は（$l\neq 0$ をもつ状態の波動関数とは違って）$r\to 0$ のときゼロにならず，したがって，電子が《核の体積》中に存

---

1) 原子の重心系では，核と電子の運動量の総和は $\boldsymbol{p}_{\text{nuc}}+\sum \boldsymbol{p}_i=0$ である．したがって，全運動エネルギーは

$$\frac{\boldsymbol{p}_{\text{nuc}}^2}{2M}+\frac{1}{2m}\sum_i \boldsymbol{p}_i^2=\frac{1}{2M}\Big(\sum_i \boldsymbol{p}_i\Big)^2+\frac{1}{2m}\sum \boldsymbol{p}_i^2.$$

在する確率が比較的大きいからである．この場合のアイソトープ・シフトを計算しよう[1]．

点電荷 Ze のクーロン場のポテンシャル Ze/r と区別して，$\varphi(r)$ を核場の真の静電ポテンシャルとしよう．このとき，電子のエネルギーの，純クーロン場におけるそれの値と比べた変化は，積分

$$\Delta E=-e\int\left(\varphi-\frac{Ze}{r}\right)\psi^2(r)dV \tag{120.2}$$

で与えられる．ここで $\psi(r)$ は電子の波動関数である（s 状態ではこの関数は球対称で実数である）．積分はここでは形式的に全空間にわたって行なわれるが，実際には被積分式中の差 $\varphi-Ze/r$ は核の体積内でのみゼロと異なっている．他方，s 状態の波動関数は $r\to0$ のとき，定数の極限に近づき（§32 参照），実際には核の外までもこの定数値のままである．したがって，$\psi(r)$ を点電荷のクーロン場に対して計算された $r=0$ のときの値で置きかえて，ψ^2 を積分記号の外に出すことができる．

これから先の積分の変形には，恒等式 $\Delta r^2=6$ を使い，(120.2) を

$$\Delta E=-\frac{1}{6}e\psi^2(0)\int\left(\varphi-\frac{Ze}{r}\right)\Delta r^2\cdot dV$$
$$=-\frac{1}{6}e\psi^2(0)\int r^2\Delta\left(\varphi-\frac{Ze}{r}\right)dV$$

の形に書きかえる（ここで体積積分の変形の際に出てきた無限遠の表面上での積分がゼロに等しいことを考慮した）．$\Delta\frac{1}{r}=-4\pi\delta(\boldsymbol{r})$ で，かつすべての r に対し $r^2\delta(\boldsymbol{r})=0$ である．静電場のポアッソンの方程式にしたがって $\Delta\varphi=-4\pi\rho$ である；ここでいまの場合，ρ は核内の電荷分布の密度である．結果として最終的に：

$$\Delta E=\frac{2\pi}{3}\psi^2(0)Ze^2\overline{r^2}. \tag{120.3}$$

ここで

$$\overline{r^2}=\frac{1}{Ze}\int\rho r^2dV$$

は核内陽子の動径の自乗の平均である（核内陽子が一様な分布のときは $\overline{r^2}=$

---

1) これから述べる核の近くの電子の運動の相対論的効果を考慮しない計算は，条件 $Ze/\hbar c\ll1$ を満たすときに正しいことがわかる．

$3R^2/5$ になるはずである，ここで R は幾何学的核半径である）．準位のアイソトープ・シフトは，二つの同位体に対する式（120.3）の差として与えられる．

§71 で量 $\psi(0)$ の見積もりを行なったが，それは（大きいと仮定された）原子番号に，$\sqrt{Z}$ のように，依存することが明らかにされた．したがって，分裂の大きさ（120.3）は R^2Z^2 に比例することがわかる．

§ 121. 原子準位の超微細構造

電子と核スピンとの相互作用の結果生ずる原子エネルギー準位の分裂は，核固有の性質による別の原子効果であり，準位の**超微細構造**と呼ばれる．上記の相互作用が弱いために，この構造の間隔は非常に小さい．もちろん，微細構造の間隔に比べてそうである．したがって，超微細構造は微細構造の各成分に対して別々に考察されなければならない．

この節では（原子分光学の習慣に従って），核スピンを i と書くことにしよう；原子の電子殻の全角運動量に対しては記号 J をそのまま使うことにする．（核といっしょにした）原子の全角運動量を $\boldsymbol{F}=\boldsymbol{J}+\boldsymbol{i}$ と書く．超微細構造の各成分は，この角運動量の大きさの確定値により特徴づけられる．角運動量の合成の一般則に従って，量子数 F は次の値をとる：

$$F=J+i, \quad J+i-1, \cdots, |J-i|. \qquad (121.1)$$

したがって，与えられた J をもつ各準位は，（もしも $i<J$ ならば）全部で $2i+1$ 個，あるいは（もしも $i>J$ ならば）$2J+1$ 個の成分に分かれる．

原子内の電子の平均距離 r は核半径 R に比べて大きいので，超微細分裂では核のもっとも低い次数の多重極モーメントと電子との相互作用が基本的な役割を果たしている．磁気的双極モーメントと電気的 4 重極モーメントがこのようなものである（電気的双極モーメントの平均はゼロに等しい．§75 参照）．

核の磁気モーメントは $\mu_{\mathrm{unc}}\sim eRv_{\mathrm{nuc}}/c$ の程度の大きさである．ここで v_{nuc} は核内核子の速度である．それと電子の磁気モーメント（$\mu_{\mathrm{el}}\sim e\hbar/mc$）との相互作用は

$$\frac{\mu_{\mathrm{unc}}\mu_{\mathrm{e}}}{r^3}\sim\frac{e^2\hbar}{mc^2}\frac{Rv_{\mathrm{nuc}}}{r^3} \qquad (121.2)$$

の程度の大きさである．

核の4重極モーメントは $Q \sim eR^2$ である．これがつくる場と電子の電荷との相互作用は

$$\frac{eQ}{r^3} \sim \frac{e^2R^2}{r^3} \tag{121.3}$$

の程度の大きさである．(121.2) と (121.3) を比べると，磁気的相互作用（したがって，それによって起こる準位の分裂）は4重極相互作用に比べて $(v_{\text{nuc}}/c)(\hbar/mcR) \sim 15$ 倍大きい．比 v_{nuc}/c は比較的小さいけれども，それだけ比 $\hbar/mcR$ が大きい．

電子と核との磁気的相互作用の演算子は

$$\hat{V}_{iJ} = a\hat{\boldsymbol{i}}\hat{\boldsymbol{J}} \tag{121.4}$$

の形をもつ（電子のスピン－軌道相互作用 (72.4) と類似している）．したがって，これであらわされる準位の分裂の F への依存性は，式

$$\frac{a}{2}F(F+1) \tag{121.5}$$

で与えられる（(72.5) 参照）．

これに対し電子と核との4重極相互作用の演算子は，核の4重極モーメントのテンソル演算子 $\hat{Q}_{ik}$ と，電子の角運動量のベクトル $\hat{\boldsymbol{J}}$ の成分とからつくられる．それは，これらの演算子からつくられるスカラー $\hat{Q}_{ik}\hat{J}_i\hat{J}_k$ に比例する．すなわち，

$$b\left[\hat{i}_i\hat{i}_k + \hat{i}_k\hat{i}_i - \frac{2}{3}i(i+1)\delta_{ik}\right]\hat{J}_i\hat{J}_k \tag{121.6}$$

の形をもつ．ここで Q_{ik} が核スピンの演算子を使って，(75.2) の形の式であらわされることを考慮した．演算子 (121.6) の固有値を計算すると（これは §84, 問題1の計算とまったく同じようにして行なわれ），準位の4重極超微細構造の，量子数 F への依存性が次式で与えられることがわかる：

$$\frac{b}{2}F^2(F+1)^2 + \frac{b}{2}F(F+1)[1-2J(J+1)-2i(i+1)]. \tag{121.7}$$

磁気的超微細分裂の効果は，s 状態にある外殻電子による準位に対してとくに顕著である；それはこの電子が核の近傍に見いだされる確率が比較的大きいためである．

外殻に一つの s 電子をもつ原子に対する超微細分裂を計算しよう (E. Fermi,

1930). この電子は，他の電子および核の自己無撞着の場のなかの運動の球対称な波動関数 $\psi(r)$ によって記述される[1].

電子と核の相互作用の演算子を，電子により（座標原点に）つくられた磁場のなかの核の磁気モーメント $\hat{\boldsymbol{\mu}}=\mu\hat{\boldsymbol{i}}/i$ のエネルギーの演算子，すなわち $-\hat{\boldsymbol{\mu}}\hat{\boldsymbol{H}}$ として求めよう．電気力学のよく知られた公式から，この磁場は

$$\hat{\boldsymbol{H}}=\frac{1}{c}\int\frac{[\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{j}}]}{r^2}dV \tag{121.8}$$

である．ここで $\hat{\boldsymbol{j}}$ は運動する電子のスピンによってつくられる電流密度のスピン演算子である．また $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{n}r$ は中心から要素 dV への動径ベクトルである[2].

(115.4) に従って

$$\hat{\boldsymbol{j}}=-2\mu_{\mathrm{B}}c\,\mathrm{rot}\,(\psi^2\hat{\boldsymbol{s}})=-2\mu_{\mathrm{B}}c\frac{d\psi^2(r)}{dr}[\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{s}}]$$

(μ_{B} はボーア磁子). $dV=r^2drdo$ と書き，積分を行なって

$$\hat{\boldsymbol{H}}=-2\mu_{\mathrm{B}}\int_0^\infty\frac{d\psi^2}{dr}dr\int[\boldsymbol{n}[\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{s}}]]do=-2\mu_{\mathrm{B}}\psi^2(0)\frac{8\pi}{3}\hat{\boldsymbol{s}}$$

を得る．相互作用の演算子に対して最終的に

$$\hat{V}_{is}=-\hat{\boldsymbol{\mu}}\hat{\boldsymbol{H}}=\frac{16\pi}{3i}\mu\mu_{\mathrm{B}}\psi^2(0)\hat{\boldsymbol{i}}\hat{\boldsymbol{s}} \tag{121.9}$$

を得る．

もしも，原子の全角運動量が $J=S=1/2$ ならば，超微細分裂は 2 重項 ($F=i\pm1/2$) を生じさせる；(121.5) および (121.9) に従って，2 重項の 2 準位間の距離として

$$E_{i+1/2}-E_{i-1/2}=\frac{8\pi}{3i}\mu\mu_{\mathrm{B}}(2i+1)\psi^2(0) \tag{121.10}$$

を得る．$\psi(0)$ の値は $\sqrt{Z}$ に比例する(§71 参照)ので，この分裂の大きさは原子番号に比例して大きくなる．

問　　題

1. 閉殻外に軌道角運動量 l をもつ電子一つを含む原子に対し（磁気的相互作用によ

---

1) 以下に記述される計算は，条件 $Ze^2/\hbar c\ll1$ を満足することを前提としている (598 頁の脚注参照).

2) 第Ⅱ巻『場の古典論』§43 公式 (43.7) 参照．この式の中でベクトル $\boldsymbol{R}$ は逆方向，すなわち dV から中心（場の観測点）への動径ベクトルであることに注意しよう．

って作られる）超微細分裂を計算せよ (E. Fermi, 1930).

解　核の磁気モーメント μ によりつくられるベクトル・ポテンシャルおよび磁場の強さは

$$\boldsymbol{A}=\frac{[\boldsymbol{\mu n}]}{r^2}, \qquad \boldsymbol{H}=\frac{3\boldsymbol{n}[\boldsymbol{\mu n}]-\boldsymbol{\mu}}{r^3}$$

（ここで div $\boldsymbol{A}=0$ である）．この式を使って相互作用の演算子を次の形に書こう：

$$\frac{|e|}{mc}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{p}}+\frac{|e|\hbar}{mc}\hat{\boldsymbol{H}}\hat{\boldsymbol{s}}=\frac{2\mu_{\mathrm{B}}}{r^3}\hat{\boldsymbol{\mu}}[\hat{\boldsymbol{l}}+3(\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{n})\boldsymbol{n}-\hat{\boldsymbol{s}}].$$

与えられた j の値をもつ状態について平均すると，角括弧内の式は $\boldsymbol{j}$ の方向を向く．したがって

$$\hat{V}_{ij}=2\mu_{\mathrm{B}}(\hat{\boldsymbol{\mu}}\hat{\boldsymbol{j}})[\hat{\boldsymbol{l}}\hat{\boldsymbol{j}}+3\overline{(\hat{\boldsymbol{s}}\boldsymbol{n})(\boldsymbol{n}\hat{\boldsymbol{j}})}-\hat{\boldsymbol{s}}\hat{\boldsymbol{j}}]\frac{\overline{r^{-3}}}{j(j+1)}$$

と書くことができる．平均値 $\overline{n_i n_k}$ は§29の問題で計算された．それを使い固有値をとると

$$\frac{2\mu_{\mathrm{B}}\mu}{i}(\boldsymbol{ij})\left[\boldsymbol{lj}+\frac{2l(l+1)\boldsymbol{sj}-6(\boldsymbol{sl})(\boldsymbol{jl})}{(2l-1)(2l+3)}\right]\frac{\overline{r^{-3}}}{j(j+1)}$$

を得る．これから，簡単な計算の後，最終的に

$$\frac{\mu_{\mathrm{B}}\mu}{i}\frac{l(l+1)}{j(j+1)}F(F+1)\overline{r^{-3}}$$

を得る．ここで $\boldsymbol{F}=\boldsymbol{j}+\boldsymbol{i}$ で，$j=l\pm1/2$ である．r^{-3} の平均は，電子の波動関数の動径部分を使って遂行される．

2.　原子準位の超微細構造の成分のゼーマン分裂を求めよ (S. A. Goudsmit, R. F. Bacher, 1930).

解　公式 (113.4) のなかで（われわれは，磁場が十分に弱く，それによって生ずる分裂が超微細構造の間隔と比べて小さいと仮定した）平均は電子状態だけでなく核スピンの方向についても行なわれる必要がある．結果として，第1の平均は前の g_J (113.7) を使って $\Delta E=\mu_{\mathrm{B}}g_J J_z H$ が得られる．第2の平均は (113.5) と同様に

$$\bar{J}_z=\frac{(\boldsymbol{JF})}{\boldsymbol{F}^2}M_F$$

を与える．このようにして，最終的に

$$\Delta E=\mu_{\mathrm{B}}g_F H M_F, \qquad g_F=g_J\frac{F(F+1)+J(J+1)-i(i+1)}{2F(F+1)}$$

を得る．

§ 122.　分子準位の超微細構造

分子のエネルギー準位の超微細構造は，原子準位の超微細構造の生因と類似の生因をもっている．

非常に多くの分子では，全電子スピンはゼロに等しい．これらの分子に対しては，核と電子の 4 重極相互作用が，準位の超微細分裂の主な原因である；このとき，スピン i がゼロともあるいは 1/2 とも異なる核がその相互作用に参与する．そうでない場合には核の 4 重極モーメントはゼロに等しいからである．

分子内の核の運動が比較的遅いために，4 重極相互作用の演算子の分子の状態についての平均は，2 段階で行われる：最初に核を固定したときの電子状態についての平均が行なわれ，つぎに分子の回転についての平均が行われる必要がある．

はじめに 2 原子分子を考えよう．第 1 段階の平均の結果，核のおのおのと電子の相互作用はスカラー $\hat{Q}_{ik}n_i n_k$ に比例する演算子であらわされる．これは，核の 4 重極モーメントのテンソル演算子と，分子軸の方向の単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ とからつくられる．これは，核スピンの方向に対して分子の方向を決める唯一の量である．$\hat{Q}_{ii}=0$ であることを考慮して，この演算子は

$$b\hat{i}_i\hat{i}_k\left(n_i n_k-\frac{1}{3}\delta_{ik}\right) \qquad (122.1)$$

の形にあらわすことができる；核スピンの分子軸への投影 i_ζ の一定値に対し，この量は $b\left[i_\zeta^2-\frac{1}{3}i(i+1)\right]$ に等しい．

つぎに，演算子 (122.1) を分子の回転について平均した結果，この演算子は保存量である回転の角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{K}}$ を使ってあらわされることがわかる．積 $n_i n_k$ の平均は，§ 29 の問題で得られた（$\boldsymbol{l}$ のかわりにベクトル $\boldsymbol{K}$ を使った）公式によって行なわれ，その結果

$$-\frac{b}{(2K-1)(2K+3)}\hat{i}_i\hat{i}_k\left[\hat{K}_i\hat{K}_k+\hat{K}_k\hat{K}_i-\frac{2}{3}\delta_{ik}K(K+1)\right] \qquad (122.2)$$

を与える．この演算子の固有値は，演算子 (121.6) に対して行なったのと同じようにして求められる．

多原子分子の場合には，(122.1) のかわりに，一般に，

$$b_{ik}\hat{i}_i\hat{i}_k \qquad (122.3)$$

の形の演算子が得られる．ここで b_{ik} は，分子の電子状態の特徴をあらわす，跡がゼロに等しいテンソルである．分子の回転について平均した後，それは，全回転角運動量 $\boldsymbol{J}$ を使って，

$$\overline{b}_{ik}=b\left[\hat{J}_i\hat{J}_k+\hat{J}_k\hat{J}_i-\frac{2}{3}J(J+1)\delta_{ik}\right] \tag{122.4}$$

の形の式であらわされることがわかる．

係数 b は原理的には，分子の慣性主軸 ξ, η, ζ に対するテンソル b_{ik} の成分を使ってあらわされる；これらの軸は分子に固定されているので，成分 $b_{\xi\xi}, \cdots$ は平均によって影響されない分子の性質である．このために，スカラー $\overline{b_{ik}J_iJ_k}$ を考察しよう．(122.4) を使った計算は

$$\overline{b_{ik}J_iJ_k}=bJ(J+1)\left[\frac{4}{3}J(J+1)-1\right] \tag{122.5}$$

を与える（計算は §29 の問題で行なわれたのと同様である）．他方，テンソル積を ξ, η, ζ 軸で展開して

$$\overline{b_{ik}J_iJ_k}=b_{\xi\xi}\overline{J_\xi^2}+b_{\eta\eta}\overline{J_\eta^2}+b_{\zeta\zeta}\overline{J_\zeta^2} \tag{122.6}$$

を得る．ここでは積 $J_\xi J_\zeta, \cdots$ の平均値がゼロに等しいことを考慮した[1]．自乗 J_ξ^2 の平均値は，こまの回転状態に対応する波動関数によって原理的に計算される．とくに，対称こまに対しては単に

$$\overline{J_\zeta^2}=k^2, \qquad \overline{J_\xi^2}=\overline{J_\eta^2}=\frac{1}{2}[J(J+1)-k^2]$$

となる．

もしも核のスピンが 1/2 に等しければ，4 重極相互作用は存在しない．この場合には，核の磁気モーメントどうしの直接の磁気的相互作用が，超微細分裂の主な原因の一つである．二つの磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}_1=\mu_1\boldsymbol{i}_1/i_1$，$\boldsymbol{\mu}_2=\mu_2\boldsymbol{i}_2/i_2$ の相互作用の演算子は，公式

$$\frac{\mu_1\mu_2}{i_1i_2r^3}[\hat{\boldsymbol{i}}_1\hat{\boldsymbol{i}}_2-3(\boldsymbol{i}_1\boldsymbol{n})(\boldsymbol{i}_2\boldsymbol{n})]$$

によって与えられる．分裂のエネルギーの計算のためには，分子の状態についての上記のような平均をする必要がある．

分子中に重い原子が存在すると，電子殻を媒介した核のモーメントの間接的相互作用も，核の直接の相互作用とともに超微細分裂に同程度の寄与をもたらす．形式的にみれば，この相互作用は，核スピンと電子の相互作用についての

1)　実際に，J の成分の一つ（たとえば J_ζ）の行列が対角的であるような表示では，積 $J_\xi J_\zeta$，$J_\eta J_\zeta$ の行列は，量子数 k の 1 だけの変化を伴う要素をもっている；非対称こまの定常状態の波動関数は，偶数だけ異なる k をもつ関数 ψ_{Jk} を含んでいる（§103 参照）．

摂動論の2次近似の効果である．§121の結果を使って，この効果と核の磁気モーメントの直接相互作用の効果との比は $(Ze^2/\hbar c)^2$ の大きさの程度であることがわかる；Zが大きいとこれは1と同程度である．

最後に，核の磁気モーメントと分子の回転の相互作用の効果が，分子準位の超微細分裂に一定の寄与を与える．回転する分子は運動する電荷の系であるから，一定の磁場をつくり出す；この磁場は，電流密度 $\boldsymbol{j}=\rho[\boldsymbol{\Omega r}]$ が与えられたときに，電気力学で知られた公式を使って計算することができる；ここで ρ は動かない分子のなかの（核と電子の）電荷密度であり，$\boldsymbol{\Omega}$ はその回転の角速度である．この場の中での核の磁気モーメントのエネルギーとして，準位の分裂の大きさが得られる；このとき，分子の角速度の成分は，その角運動量の成分を使ってあらわす必要がある（§103参照）．

第17章 弾性衝突

§ 123. 散乱の一般論

古典力学において２粒子の衝突は，それらの速度および《衝突パラメーター》（つまり２粒子が相互作用のないときに互いにすれちがうであろう距離）によって完全に決定される．量子力学においては，確定した速度をもつ運動では軌道の概念は意味を失い，それに伴って《衝突パラメーター》の概念も意味を失うので，問題の設定が全く変わってくる．理論の目的となるものは，ここでは単に衝突の結果粒子がある角度だけまげられる（あるいは，いわゆる**散乱**される）確率を計算することだけである．ここでわれわれは，いわゆる**弾性衝突**，つまり粒子のいかなる変換も起こらない，あるいは（もしこれらの粒子が複合粒子であるとすると）それらの粒子の内部状態も変化しない衝突を扱うことにする．

弾性衝突の問題は，あらゆる２体問題と同じく，動かない中心力の場 $U(r)$ 中にある換算質量をもつ１粒子の散乱の問題に帰着される[1]．このような帰着を実現するには，両粒子の重心が静止している座標系への変換を行なえばよい．この系での散乱角を θ であらわすことにしよう．それは，２粒子のうちの一つ（２番目）の粒子が衝突の前まで静止している《実験室》座標系における両粒子の偏角 ϑ_1 および ϑ_2 と次の簡単な式で結ばれている：

$$\tan\vartheta_1=\frac{m_2\sin\theta}{m_1+m_2\cos\theta},\qquad \vartheta_2=\frac{\pi-\theta}{2} \tag{123.1}$$

ここで m_1, m_2 は粒子の質量である（第Ⅰ巻『力学』§17参照）．とくに，もし両粒子の質量が等しい $(m_1=m_2)$ と，次の簡単な式を得る：

---

1) （粒子がスピンをもっている場合に）粒子のスピン-軌道相互作用を無視することにする．ここで場が中心対称であることを仮定して，たとえば分子による電子の散乱のような過程をも同様に考察から除外することにする．

$$\vartheta_1=\frac{\theta}{2}, \qquad \vartheta_2=\frac{\pi-\theta}{2}. \tag{123.2}$$

和 $\vartheta_1+\vartheta_2=\pi/2$，つまり両粒子は直角をなして飛び去る．

以下において本章では（とくに前もって反対のことわりがない場合には），重心が静止した座標系をいつも用い，m は衝突する粒子の換算質量をあらわすことにする．

z 軸の正方向に運動している自由粒子は平面波により記述され，これを $\psi=e^{ikz}$ の形に書こう．つまり波の流れの密度が粒子の速度 v に等しくなるような規格化を選ぶことにする．散乱された粒子は，散乱中心から遠く離れたところで $f(\theta)e^{ikr}/r$ の形をした発散する球面波で記述される．ここで $f(\theta)$ は散乱角 θ（z 軸と散乱粒子の方向とのなす角）のある関数である．この関数は**散乱振幅**と呼ばれる．したがって，ポテンシャル・エネルギー $U(r)$ をもつシュレーディンガー方程式の解である厳密な波動関数は，遠距離で漸近形

$$\psi\approx e^{ikz}+\frac{f(\theta)}{r}e^{ikr} \tag{123.3}$$

をもたなければならない．

散乱粒子が単位時間あたり表面要素 $dS=r^2do$（do は立体角要素）を通過する確率は，$vr^{-2}|f|^2dS=v|f|^2do$ である[1]．これの入射波の流れの密度に対する比は

$$d\sigma=|f(\theta)|^2do \tag{123.4}$$

である．この量は面積の次元をもっており，立体角 do 内への散乱の**有効断面積**（あるいは単に**断面積**）と呼ばれる．もし $do=2\pi\sin\theta d\theta$ と置くと，θ および $\theta+d\theta$ の間の角度の散乱に対して，断面積

$$d\sigma=2\pi\sin\theta|f(\theta)|^2d\theta \tag{123.5}$$

を得る．

中心力場 $U(r)$ における散乱を記述するシュレーディンガー方程式の解は，もちろん入射粒子の方向である z 軸に関して軸対称でなければならない．あら

1）この議論では，散乱に関する実際の実験ではいつも満たされているように，入射粒子束は（回折効果を避けるために）幅広く，しかも有限のスリットによって仕切られていることを暗に意味している．このようなわけで，式（123.3）の両項間の干渉は存在しない；絶対値の自乗 $|\psi|^2$ は入射波の存在しない点でとることができる．

ゆるこのような解は，与えられたエネルギー $\hbar^2k^2/2m$ およびいろいろな値 l およびゼロに等しい z 成分をもつ軌道角運動量をもつ粒子の与えられた場における運動に対応する連続スペクトルの波動関数の重ね合わせの形にあらわすことができる（これらの関数は z 軸のまわりの方位角 φ に依存しない．すなわち軸対称である)．したがって求める波動関数は次の形をもつ：

$$\psi=\sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos\theta) R_{kl}(r). \tag{123.6}$$

ここで A_l は定数であり，$R_{kl}(r)$ は次の方程式を満足する動径関数である：

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{kl}}{dr}\right)+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2m}{\hbar^2}U(r)\right]R_{kl}=0 \tag{123.7}$$

係数 A_l は，関数 (123.6) が遠方で漸近形 (123.3) をもつように選ばれなければならない．そのためには

$$A_l=\frac{1}{2k}(2l+1)i^l\exp(i\delta_l) \tag{123.8}$$

と置かなければならないことを示そう．ここで δ_l は関数 R_{kl} の位相のずれである．このことにより，これらの位相を用いて散乱振幅を表わす問題も解かれる．

関数 R_{kl} の漸近形は式 (33.20) により次のように与えられる：

$$\begin{aligned}R_{kl}&\approx\frac{2}{r}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)\\&=\frac{1}{ir}\{(-i)^l\exp[i(kr+\delta_l)]-i^l\exp[-i(kr+\delta_l)]\}.\end{aligned}$$

この式および (123.8) を (123.6) に代入すると，波動関数の漸近形が次の形で得られる：

$$\psi=\frac{1}{2ikr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)[(-1)^{l+1}e^{-ikr}+S_l e^{ikr}] \tag{123.9}$$

となり，ここで記号

$$S_l=\exp(2i\delta_l) \tag{123.10}$$

と置いた．

他方，このような変換の後で，平面波 (34.2) の展開は

$$e^{ikz}\approx\frac{1}{2ikr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)[(-1)^{l+1}e^{-ikr}+e^{ikr}]$$

となる．差 $\psi-e^{ikz}$ の中で，因子 e^{-ikr} を含むすべての項は，当然ながら消えて

しまう．この差の中の e^{ikr}/r の係数に対して，すなわち散乱振幅に対して

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(S_l-1)P_l(\cos\theta) \tag{123.11}$$

を得る．この式は散乱振幅を位相 δ_l であらわす問題の解である（H. Faxen, J. Holtsmark, 1927）[1]．

いま $d\sigma$ をすべての角度について積分すると，全散乱断面積 σ が得られる．これは入射波中の流れの密度に対する，（単位時間に）粒子が散乱される全確率の比をあらわしている．（123.11）を積分

$$\sigma=2\pi\int_0^{\pi}|f(\theta)|^2\sin\theta d\theta$$

に代入し，異なる l をもつルジャンドル多項式は直交するが，しかし

$$\int_0^{\pi}P_l^2(\cos\theta)\sin\theta d\theta=\frac{2}{2l+1}$$

となることを思い起こせば，全断面積に対する次の式を得る．

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l. \tag{123.12}$$

ここで和の各項は，与えられた軌道角運動量 l をもつ粒子の散乱に対する**部分断面積** σ_l をあらわしている．この断面積の可能な極大値は

$$\sigma_{l\,\max}=\frac{4\pi}{k^2}(2l+1) \tag{123.13}$$

であることを強調しておく，これを式（34.5）と比較すると，角運動量 l をもって散乱される粒子の数は，入射束における同じ粒子の数の4倍となることが可能であることがわかる．この現象は純粋に量子的効果であって，散乱された粒子と散乱されない粒子との間の干渉によるものである．

1）あらかじめ知られている位相 δ_l に基づいて，散乱ポテンシャルの形を復元する問題は原理的な興味がある．この問題はイ・エム・ゲルファンド，ベ・エム・レヴィタンおよびヴェ・ア・マルチェンコ（И. М. Гельфанд, Б. М. Левитан и В. А. Марченко）によって解かれた．$U(r)$ を知るには，$k=0$ から $k=\infty$ までの全域にわたって波動ベクトルの関数として $\delta_0(k)$ を知り，また（負の）離散エネルギー準位 E_n が一般に存在する場合に，それに対応する状態の波動関数の漸近式（$r\to\infty$ に対する）

$$R_{n0}\approx a_n e^{-\kappa_n r}/r, \qquad (\kappa_n=\sqrt{2m|E_n|}/\hbar)$$

における係数 a_n を知れば，原理的に十分であることが判明した．これらのデータに基づく $U(r)$ の決定は，ある線形積分方程式を解くことに帰着する．この問題の系統的な記述は次の本にある：V. de Alfaro and T. Regge, Potential Scattering, North-Holland, Amsterdam, 1965.

あとでまた**部分散乱振幅** f_l を用いることが便利となるであろう．それは展開式

$$f(\theta)=\sum_l (2l+1) f_l P_l(\cos\theta) \tag{123.14}$$

の係数として定義される．(123.11) により，それは位相 δ_l を用いて

$$f_l=\frac{1}{2ik}(S_l-1)=\frac{1}{2ik}(e^{2i\delta_l}-1) \tag{123.15}$$

とあらわされ，部分断面積は

$$\sigma_l=4\pi(2l+1)|f_l|^2 \tag{123.16}$$

となる．

§ 124. 一般式の考察

前節で得た諸式は，原理的に，無限遠でゼロとなる任意の場 $U(r)$ における散乱に対して適用される．これらの式を考察することは，それらの中にあらわれている位相 δ_l の性質を考察することに帰着される．

大きい l の値をもつ位相 δ_l の値の大きさの程度を評価するには，大きい l に対して運動は準古典的 (§ 49 参照) であることを用いる．したがって，波動関数の位相は積分

$$\int_{r_0}^{r}\sqrt{k^2-\frac{(l+1/2)^2}{r^2}-\frac{2mU(r)}{\hbar^2}}\,dr+\frac{\pi}{4}$$

により決定される．ここで r_0 は根号の中の表式をゼロと置いたときの根である ($r>r_0$ は古典的に近づき得る運動の範囲である)．これから自由運動の波動関数の位相

$$\int_{r_0}^{r}\sqrt{k^2-\frac{(l+1/2)^2}{r^2}}\,dr+\frac{\pi}{4}$$

を差し引き，$r\to\infty$ と置くと，定義により δ_l の値を得る．大きい l に対して r_0 の値も大きい．したがって，積分の全域にわたって $U(r)$ は小さく，近似的に

$$\delta_l=-\int_{r_0}^{\infty}\frac{mU(r)\,dr}{\hbar^2\sqrt{k^2-\frac{(l+1/2)^2}{r^2}}} \tag{124.1}$$

を得る．大きさの程度を見ると，この積分は (収束するならば)

$$\delta_l\sim\frac{mU(r_0)r_0}{k\hbar^2} \tag{124.2}$$

となる．r_0 の値の程度は，$r_0 \sim l/k$ である．

もしも $U(r)$ が無限遠で，$n>1$ として r^{-n} のようにゼロになるならば，積分 (124.1) は収束し，位相 δ_l は有限である．反対に $n \leqq 1$ に対して積分は発散し，したがって位相 δ_l は無限大となる．このことは任意の l に対して成り立つ．そのわけは，積分 (124.1) が収束するか発散するかは大きい r に対する $U(r)$ の振舞いに依存し，大きい距離では（場 $U(r)$ はもはや弱く）動径運動は任意の l に対して準古典的であるからである．無限大の δ_l に対して式 (123.11), (123.12) をどのように理解すべきかを以下に示そう．

最初に全散乱断面積をあらわす級数 (123.12) の収束性を考察しよう．大きい l に対しては，位相 $\delta_l \ll 1$ である．このことは，$U(r)$ が $1/r$ よりも速く減少することを考慮すれば，(124.1) より容易にわかる．したがって，$\sin^2\delta_l \approx \delta_l^2$ と置くことができ，それゆえ，級数 (123.12) の中の高次の項の和は $\sum\limits_{l\gg1} l\delta_l^2$ の程度となる．級数の収束性に関するよく知られた積分の判定条件により，積分 $\int^\infty l\delta_l^2 dl$ が収束するならば当の級数が収束すると結論される．これに (124.2) を代入し，l を kr_0 に置きかえれば，積分

$$\int^\infty U^2(r_0)r_0^3dr_0$$

が得られる．

もしも $U(r)$ が無限遠で，$n>2$ として r^{-n} のように減少するならば，この積分は収束し，全断面積は有限となる．反対にもしも場 $U(r)$ が $1/r^2$ のようにか，あるいはそれよりおそく減少するならば，全断面積は無限大となる．物理的にこのことは，場が距離とともにゆっくり減少する場合には，小角での散乱確率は非常に大きいということによるものである．これに関連して思い出されるのは，古典力学においては $r\to\infty$ でのみゼロとなるあらゆる場において，いくら大きくても有限の衝突パラメーター ρ をもって通過する粒子は，小さくはあるがゼロとは異なる角度で必ず散乱される；したがって，全散乱断面積は，いかなる法則で減少する $U(r)$ に対しても無限大となる[1)]．量子力学においては，このような議論は次の理由により成り立たない．すなわち，ある角度での散乱をいえるのは，粒子の運動方向の不確定さに比べてこの角度が大きいとい

1) このことは，古典力学で全断面積を与える積分 $\int 2\pi\rho d\rho$ が発散することからわかる．

う条件に対してのみできることである．もしも《衝突パラメーター》が $\Delta\rho$ の精度で知られているならば，運動量の横成分に $\hbar/\Delta\rho$ の不確定さを生じ，したがって角度に $\sim\hbar/mv\Delta\rho$ の不確定さを生ずる．

ゆっくりと減少する $U(r)$ に対して，小角での散乱が重要な役割を果たすことを考慮すると，次のような問題が自然に起こってくる．すなわち，$1/r^2$ よりも速く減少する $U(r)$ に対してさえも，$\theta=0$ における散乱振幅 $f(\theta)$ は発散するであろうか．(123.11) で $\theta=0$ と置くと，和の中の高次の項に対して $\sum_{l\gg 1} l\delta_l$ に比例した式が得られる．前と同じような議論を行なうと，級数の収束の判定条件として積分

$$\int^{\infty} U(r_0) r_0^2 dr_0$$

が得られて，これは $U(r)\backsim r^{-n}(n\leqq 3)$ に対してもはや発散する．したがって $\theta=0$ における散乱振幅は，$1/r^3$ あるいはそれよりゆるやかに減少する場において無限大となる．

最後に位相 δ_l それ自身が無限大である場合を考察しよう．これは $U(r)\backsim r^{-n}$ $(n\leqq 1)$ に対して起こる．上で得られた結果からあらかじめ明らかであるように，十分にゆるやかに減少する場に対しては，全断面積も散乱振幅も $\theta=0$ において無限大となる．しかしながら，$\theta\neq 0$ に対する $f(\theta)$ を計算する問題が残る．まず最初に次の式が成り立つことに気づく[1]：

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) = 4\delta(1-\cos\theta). \tag{124.3}$$

いいかえると，あらゆる $\theta\neq 0$ に対して，この和はゼロである．したがって，散乱振幅に対する式 (123.11) において，$\theta\neq 0$ のとき和の各項の角括弧の中の 1 を無視することができて，その結果

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) e^{2i\delta_l}. \tag{124.4}$$

となる．もしも，等式の右辺に定数因子 $\exp(-2i\delta_0)$ を掛けると，絶対値の自乗 $|f(\theta)|^2$ で与えられる有効断面積には変わりがなく，複素関数 $f(\theta)$ の位相は

1) この式は，ルジャンドル多項式による δ-関数の展開式をあらわしていて，両辺に $\sin\theta P_l(\cos\theta)$ を掛けて，θ に関して積分すれば直接証明される．この場合，偶関数 $\delta(x)$ の積分 $\int_0^{\infty} \delta(x) dx$ は 1/2 の値をとる．

重要でない定数だけ変わる．他方式 (124.1) の差 $\delta_l-\delta_0$ において，$U(r)$ の発散する積分は落ちて，ある有限の値にとどまる．このようなわけで，いま考察している場合の散乱振幅の計算のためには，次式を用いることができる：

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)e^{2i(\delta_l-\delta_0)}. \tag{124.5}$$

§ 125. 散乱に対するユニタリ条件

任意の（必ずしも中心力でない）場における散乱振幅は，あるまったく一般的な物理的要請の結果として，定まった関係を満足する．

任意の場における弾性散乱に対して，遠距離での波動関数の漸近形は

$$\psi\approx e^{ikr\boldsymbol{nn}'}+\frac{1}{r}f(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}')e^{ikr} \tag{125.1}$$

である．この式が (123.3) と異なる点は，散乱振幅が2つの単位ベクトルの方向に依存していることである．つまり粒子の入射方向 ($\boldsymbol{n}$) および散乱方向 ($\boldsymbol{n}'$) に依存し，それらの間の角度のみに依存するわけではない．

異なる入射方向 $\boldsymbol{n}$ をもつ (125.1) の形の関数の任意の線形結合もまたある可能な散乱過程をあらわす．関数 (125.1) に任意の係数 $F(\boldsymbol{n})$ を掛けて，あらゆる方向 $\boldsymbol{n}$（立体角要素 do）にわたって積分すると，このような線形結合を積分

$$\int F(\boldsymbol{n})e^{ikr\boldsymbol{nn}'}do+\frac{e^{ikr}}{r}\int F(\boldsymbol{n})f(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}')do \tag{125.2}$$

の形に書くことができる．距離 r は十分に大きいので，最初の積分の中の因子 $\exp(ikr\boldsymbol{nn}')$ は変動するベクトル $\boldsymbol{n}$ の方向に依存した急速に振動する関数である．したがって積分の値は，主として指数関数が極値をとる $\boldsymbol{n}$ の値 ($\boldsymbol{n}=\pm\boldsymbol{n}'$) に近い領域で決定される．それらの領域ではそれぞれ因子 $F(\boldsymbol{n})\approx F(\pm\boldsymbol{n}')$ は積分記号の外に出すことができて，そのあとで積分を行なうと[1]：

$$2\pi iF(-\boldsymbol{n}')\frac{e^{-ikr}}{kr}-2\pi iF(\boldsymbol{n}')\frac{e^{ikr}}{kr}+\frac{e^{ikr}}{r}\int f(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}')F(\boldsymbol{n})do.$$

この式は共通因子 $2\pi i/k$ を落として，簡潔な演算子の形に書きかえることがで

---

1) この積分を行なうためには，変数 $\mu=\cos\theta$（θ は $\boldsymbol{n}$ および $\boldsymbol{n}'$ の間の角度）の積分経路を μ の複素平面内で移動して，両端 $\mu=\pm1$ を固定したまま，μ が上の半平面内に入るように湾曲させるようにする．すると，これらの両端のおのおのから離れると，関数 $e^{ikr\mu}$ は急速に減衰する．

きる：

$$\frac{e^{-ikr}}{r}F(-\boldsymbol{n}')-\frac{e^{ikr}}{r}\hat{S}F(\boldsymbol{n}'). \tag{125.3}$$

ここで

$$\hat{S}=1+2ik\hat{f}. \tag{125.4}$$

そして $\hat{f}$ は積分演算子

$$\hat{f}F(\boldsymbol{n}')=\frac{1}{4\pi}\int f(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}')F(\boldsymbol{n})do \tag{125.5}$$

である．演算子 $\hat{S}$ は**散乱演算子（あるいは散乱行列）**または単に ***S*-行列**と呼ばれる；これは W. ハイゼンベルクによって初めて導入された（1943）．

（125.3）の第1項は中心への収束波をあらわし，第2項は中心からの発散波をあらわす．弾性散乱における粒子数の保存は，入射波および反射波における粒子の全波束が等しいことによってあらわされる．いいかえると，これらの二つの波は同じように規格化されなければならない．そのためには，散乱演算子 $\hat{S}$ はユニタリでなければならない（§12）．つまり

$$\hat{S}\hat{S}^{+}=1 \tag{125.6}$$

でなければならない．あるいは（125.4）を代入して，展開を行なうと：

$$\hat{f}-\hat{f}^{+}=2ik\hat{f}\hat{f}^{+}. \tag{125.7}$$

最後に，定義式（125.5）を考慮すると，散乱に対する**ユニタリ条件**は最終的に次の形に書ける：

$$f(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}')-f^{*}(\boldsymbol{n}',\boldsymbol{n})=\frac{ik}{2\pi}\int f(\boldsymbol{n}',\boldsymbol{n}'')f^{*}(\boldsymbol{n}',\boldsymbol{n}'')do''. \tag{125.8}$$

$\boldsymbol{n}=\boldsymbol{n}'$ のとき等式の右辺の積分は全有効散乱断面積

$$\sigma=\int|f(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}'')|^{2}do''$$

に他ならない．これに対して，等式の左辺の差はこの場合振幅 $f(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n})$ の虚部に帰着される．このようなわけで，散乱角がゼロの場合，弾性散乱の全断面積と散乱振幅の虚部との間に次のような一般的関係が得られる：

$$\operatorname{Im}f(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n})=\frac{k}{4\pi}\sigma \tag{125.9}$$

（これは散乱に対する**光学定理**と呼ばれる）．

散乱振幅のもう一つの一般的性質を，時間反転に関する対称性の要求から導

くことができる．量子力学においてはこの対称性は，もしも関数ψがある可能な状態を記述するならば，複素共役関数ψ^*もある可能な状態に対応する（§18）という事実にあらわされている．したがって，波動関数（125.3）の複素共役関数

$$\frac{e^{ikr}}{r}F^*(-\boldsymbol{n}')-\frac{e^{-ikr}}{r}\hat{S}^*F^*(\boldsymbol{n}')$$

もまたある可能な散乱過程を記述している．新しい任意関数を導入し，それを$-\hat{S}^*F^*(\boldsymbol{n}')=\Phi(-\boldsymbol{n}')$とあらわそう．演算子$\hat{S}$のユニタリ性を考慮すると

$$F^*(\boldsymbol{n}')=-\hat{S}^{*-1}\Phi(-\boldsymbol{n}')=-\tilde{\hat{S}}\Phi(-\boldsymbol{n}')$$

が得られる；ベクトル$\boldsymbol{n}$および$\boldsymbol{n}'$の符号を変える座標反転の演算子$\hat{P}$を導入すると，次のように書ける：

$$F^*(-\boldsymbol{n}')=\hat{P}F^*(\boldsymbol{n}')=-\hat{P}\tilde{\hat{S}}\hat{P}\Phi(\boldsymbol{n}').$$

したがって，時間に関して反転した次の形の波動関数が得られる：

$$\frac{e^{-ikr}}{r}\Phi(-\boldsymbol{n}')-\frac{e^{ikr}}{r}\hat{P}\tilde{\hat{S}}\hat{P}\Phi(\boldsymbol{n}').$$

これは最初の波動関数（125.3）と本質的に同じでなければならない．比較により，そのために満足しなければならない条件は

$$\hat{P}\tilde{\hat{S}}\hat{P}=\hat{S} \tag{125.10}$$

である；すると両関数は任意関数の記号が異なるだけとなる．

散乱振幅に対する同様の関係は，演算子の方程式（125.10）を行列の方程式に変換することによって得られる．転置によって初めおよび終わりのベクトル$\boldsymbol{n}$および$\boldsymbol{n}'$が置換され，反転によってそれらの符号が変わる．したがって次式を得る：

$$S(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}')=S(-\boldsymbol{n}',-\boldsymbol{n}). \tag{125.11}$$

あるいは同じことだが：

$$f(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}')=f(-\boldsymbol{n}',-\boldsymbol{n}). \tag{125.12}$$

この関係（いわゆる**相反定理**）は次の当然な結果をあらわしている：時間反転によって互いに変換される二つの散乱過程の振幅は互いに等しい．時間反転は初めおよび終りの状態を置換し，それらの状態にある粒子の運動方向を反転する．

中心力場における散乱に対しては，上に得られた一般的関係式は簡単になる．この場合振幅 $f(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{n}')$ は $\boldsymbol{n}$ および $\boldsymbol{n}'$ の間の角度 θ にのみ依存する．したがって，方程式 (125.12) は恒等式となる．ユニタリ条件 (125.8) は次の形をもつ：

$$\mathrm{Im}\, f(\theta) = \frac{k}{4\pi}\int f(\gamma) f^*(\gamma') do''. \tag{125.13}$$

ここで γ, γ' は $\boldsymbol{n}, \boldsymbol{n}'$ と空間に固定されたある方向 $\boldsymbol{n}''$ との間の角度である．もしも $f(\theta)$ を展開式 (123.14) の形にあらわすと，球関数に対する加法定理(c.10)を用いて，(125.13) から部分振幅に対する次の関係式が得られる：

$$\mathrm{Im}\, f_l = k|f_l|^2. \tag{125.14}$$

この式は式 (123.15) からも直接得ることができる．それによれば $|2ikf_l+1|^2=1$ だからである．中心力場における散乱に対する光学定理 (125.9) もまた式 (123.11) および (123.12) から直接導くことは容易である．

(125.14) を $\mathrm{Im}\,(1/f_l) = -k$ の形に書きかえると，振幅 f_l は次の形をもたなければならないことがわかる：

$$f_l = \frac{1}{g_l - ik}. \tag{125.15}$$

ここで $g_l = g_l(k)$ は実の量である．これは位相 δ_l と次の関係で結ばれている：

$$g_l = k \cot \delta_l. \tag{125.16}$$

以下において，このような振幅の式をしばしば使うであろう．

中心力場における散乱に対して，上で導入した散乱演算子の概念と，§123 で記述した理論にあらわれる量との間の関係を考察しよう．

中心力場において軌道角運動量は保存されるので，散乱演算子は角運動量演算子と可換である．いいかえると，S-行列は l-表示において対角形である．この場合，演算子 $\hat{S}$ のユニタリ性のために，$\hat{S}$ の固有値はその絶対値が 1，つまり δ_l を実数とする $\exp(2i\delta_l)$ の形をもたなければならない．容易にわかるように，この量は波動関数の位相のずれと同じであり，したがって S-行列の固有値は §123 で導入した量 S_l (123.10) と同じである；演算子 $\hat{f} = (\hat{S}-1)/2ik$ の固有値はそれぞれ部分振幅 (123.15) と同じである．実際に，もしも関数 $F(\boldsymbol{n})$ として $P_l(\cos\theta)$ を選べば（この場合 $F(-\boldsymbol{n}) = P_l(-\cos\theta) = (-1)^l P_l(\cos\theta)$），波動関数 (125.3) は (123.9) の和の各項によってあらわされるシュレーディン

ガー方程式の解と同じでなければならない；このことはつまり

$$\hat{S}P_l(\cos\theta)=S_lP_l(\cos\theta)$$

を意味する．

z 軸に沿って入射する平面波に対して，(125.3) の中の関数 $F(\boldsymbol{n})$ は δ–関数 $F=4\delta(1-\cos\theta)$ である．ここで θ は $\boldsymbol{n}$ および z 軸の間の角度であり，δ–関数は§124 の 613 頁の脚注に示したように定義し，その係数は定義式 (125.5) の右辺に代入したときに単に $f(\theta)$ が得られるように選ぶものとする（ここでは θ は $\boldsymbol{n}'$ および z 軸の間の角度である)．δ–関数を (124.3) の形

$$F=4\delta(1-\cos\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta) \tag{125.17}$$

にあらわし，それに演算子 $\hat{f}$ を適用すると，当然のことながら (123.14) の形の散乱振幅が得られる．

最後に，もう一つの注意をしておこう．数学的観点からすれば，あらかじめ与えられるすべての関数 $f(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}')$ がある場における散乱振幅になり得るものではないことをユニタリ条件 (125.8) は示している．たとえば，あらゆる関数 $f(\theta)$ がある中心力場における散乱振幅になり得るものではない．(125.13) のために，それの実部と虚部との間には定まった関係が満たされなければならない．もしも $f(\theta)=|f|e^{i\alpha}$ と書いて，すべての角度に対して絶対値 $|f|$ が与えられると，関係式 (125.13) は積分方程式を与え，それからまだ知られていない位相 $\alpha(\theta)$ を決定することが原理的にできる．いいかえると，すべての角度に対して知られた散乱断面積（すなわち自乗 $|f|^2$）に基づいて振幅を復元することが原理的に可能である．しかしながら，この復元はまったく一意的ではなく，

$$f(\theta)\to-f^*(\theta) \tag{125.18}$$

の交換を許す程度にしか振幅を決定することができない．これにより方程式 (125.13) は変わらない．そしてもちろん断面積 $|f|^2$ も変わらない．変換 (125.18) は，(123.11) の中のすべての位相 δ_l の符号を同時に変えることと同等である．しかしながら，もしも散乱振幅が角度のみならず，エネルギーにも依存すると考えられるならば，この非一意性は取り除かれる．われわれは後 (§128, §129) に見るように，エネルギーの関数としての振幅の解析的性質は，

変換 (125.18) に関して不変でない.

§ 126. ボルンの公式

散乱場を摂動とみなすことができるひじょうに重要な場合に，散乱断面積は一般的な形で計算できる[1]. § 45 で示されたように，このことは次の二つの条件のうち一つでも満たされていれば可能である：

$$|U| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{126.1}$$

または

$$|U| \ll \frac{\hbar v}{a} = \frac{\hbar^2}{ma^2} ka. \tag{126.2}$$

ここで a は場 $U(\boldsymbol{r})$ の作用の範囲，U は場が存在する主な部分におけるその値の程度である．最初の条件が満たされる場合には，この近似はあらゆる速度に対して適用される．第 2 の条件からわかるように，この近似は十分に速い粒子に対してはあらゆる場合に適用される．

§ 45 と同じく，波動関数を $\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)}$ の形に求めよう．ここで $\psi^{(0)} = e^{i\boldsymbol{kr}}$ は波動ベクトル $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{p}/\hbar$ をもつ入射粒子に対応している．式 (45.3) より次式を得る：

$$\psi^{(1)}(x, y, z) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(x', y', z') e^{i(\boldsymbol{kr}' + kR)} \frac{dV'}{R}. \tag{126.3}$$

散乱中心を座標原点に選び，$\psi^{(1)}$ を観測する点の動径ベクトル $\boldsymbol{R}_0$ を導入し，$\boldsymbol{R}_0$ の方向の単位ベクトルを $\boldsymbol{n}'$ と名づける．体積要素 dV' の動径ベクトルを $\boldsymbol{r}'$ とすれば，$\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R}_0 - \boldsymbol{r}'$ となる．中心から遠距離では $R_0 \gg r'$，したがって：

$$R = |\boldsymbol{R}_0 - \boldsymbol{r}'| \approx R_0 - \boldsymbol{r}'\boldsymbol{n}'.$$

これを (126.3) に代入すると，$\psi^{(1)}$ に対する次の漸近形が得られる：

$$\psi^{(1)} \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikR_0}}{R_0} \int U(\boldsymbol{r}') e^{i(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}')\boldsymbol{r}'} dV'$$

(ここで $\boldsymbol{k}' = k\boldsymbol{n}'$ は散乱後の粒子の波動ベクトルである)．これを (123.3) における散乱振幅の定義と比較すると，散乱振幅の式として

---

1) § 123 で展開された一般論においては，この近似はすべての位相 δ_l が小さい場合に対応している；それに加えて，これらの位相はシュレーディンガー方程式から計算できることが必要である．その場合，ポテンシャル・エネルギーは摂動とみなされる (問題 4 参照).

$$f=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int Ue^{-i\boldsymbol{qr}}dV \qquad (126.4)$$

を得る．ここで積分変数の記号を書きかえ，ベクトル

$$\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k} \qquad (126.5)$$

を導入した．この絶対値は

$$q=2k\sin\frac{\theta}{2} \qquad (126.6)$$

であり，ここで θ は $\boldsymbol{k}$ および $\boldsymbol{k}'$ の間の角度，すなわち散乱角である．

最後に，散乱振幅の絶対値の自乗をとると，立体角要素 do への散乱断面積に対する次の式が得られる：

$$d\sigma=\frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int Ue^{-i\boldsymbol{qr}}dV\right|^2 do. \qquad (126.7)$$

これからわかるように，$\hbar\boldsymbol{q}$ だけの運動量の変化を伴う散乱は，場 U の対応するフーリエ成分の絶対値の自乗によって決定される．式 (126.7) はボルンによって初めて得られた (M. Born, 1926)；衝突の理論においてこれに対応する近似はしばしば**ボルン近似**と呼ばれる．

この近似では次の関係が成り立っていることがわかる：

$$f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')=f^*(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}). \qquad (126.8)$$

これは（文字通りの意味において）順散乱過程および逆散乱過程の振幅の間の関係である．すなわち時間反転に対するのと同様，初めと終わりの運動量をそれらの符号を変えることなく互いに置換することにより得られる異なる二つの過程の間の関係である．したがって，散乱においては（相反定理 (125.12) の他に）付加的な対称性があらわれる．この性質は摂動論において散乱振幅が小さいことと密接に関連しており，ユニタリ条件 (125.8) でもしも f についての 2 次の積分項を無視できるならば，それからただちに導かれる[1]．

式 (126.7) はまた別の方法によっても得ることができる（しかしながら，それによっては散乱振幅の位相を決定することができない）．すなわちわれわれは一般式 (43.1) から出発することができる．それによると連続スペクトルの状態間の遷移確率は次式で与えられる：

---

1) これから明らかなことは，この性質は摂動論の 2 次近似へ移行するともはや成り立たなくなることである．このことについては §130 で式 (130.13) に関連して直接明らかになる．

$$dw_{fi}=\frac{2\pi}{\hbar}|U_{fi}|^2\delta(E_f-E_i)d\nu_f.$$

この場合には，この式を，与えられた初めの運動量$\boldsymbol{p}$をもつ入射粒子の状態から，立体角要素do'の中へ散乱されて運動量$\boldsymbol{p}'$をもつ粒子の状態への遷移に適用しなければならない．状態の間隔$d\nu_f$としては$d^3p'/(2\pi\hbar)^3$をとろう．始めと終りのエネルギーの差を$E_f-E_i=(p'^2-p^2)/2m$と置くと，次式を得る：

$$dw_{p'p}=\frac{4\pi m}{\hbar}|U_{p'p}|^2\delta(p'^2-p^2)\frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}. \tag{126.9}$$

入射および散乱粒子の波動関数は平面波である．状態の間隔$d\nu_f$として空間要素$\boldsymbol{p}/2\pi\hbar$を選んだので，終りの波動関数は$\boldsymbol{p}/2\pi\hbar$のδ–関数で規格化されなければならない：

$$\psi_{p'}=e^{i\boldsymbol{p}'\boldsymbol{r}/\hbar}. \tag{126.10}$$

これに反して，初めの波動関数は流れの密度が1となるように規格化する：

$$\psi_p=\sqrt{\frac{m}{p}}e^{i\boldsymbol{p}\boldsymbol{r}/\hbar}. \tag{126.11}$$

すると式(126.9)は面積の次元をもち，微分散乱断面積をあらわす．

式(126.9)にδ–関数が存在することは，$p'=p$すなわち弾性散乱で当然期待されように，運動量の絶対値は変わらないということである．運動量空間における球座標へ移行して（つまりd^3p'を$p'^2dp'do'=\frac{1}{2}p'd(p'^2)do'$に置きかえて）$p'^2$に関して積分を行なえば，$\delta$–関数を除くことができる．この積分は被積分関数の中の絶対値p'をpに置きかえることに帰着される．その結果次式を得る：

$$d\sigma=\frac{mp}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int\psi_{p'}^*U\psi_p dV\right|^2do'.$$

これに関数(126.10)および(126.11)を代入すると，再び式(126.7)に到達する．

(126.7)の形ではこの式は，rのみの関数ではなく座標の任意の関数である場$U(x,y,z)$による散乱に適用される．しかしながら中心力場$U(r)$の場合には，この式をさらに変換できる．

積分

$$\int U(r)e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}dV$$

において，ベクトル $\mathbf{q}$ の方向に極軸を選んだ球空間座標 r, ϑ, φ を用いることにしよう（極角を ϑ であらわして，散乱角 θ と区別する）．ϑ および φ に関する積分は実行できて，その結果次式を得る：

$$\int_0^\infty\int_0^{2\pi}\int_0^\pi U(r)e^{iqr\cos\vartheta}r^2\sin\vartheta d\vartheta d\varphi dr=4\pi\int_0^\infty U(r)\frac{\sin qr}{q}rdr.$$

この式を (126.4) に代入すると，中心対称場における散乱振幅に対する次のような式が得られる：

$$f=-\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty U(r)\frac{\sin qr}{q}rdr. \qquad (126.12)$$

$\theta=0$（すなわち $q=0$）のとき，もしも $U(r)$ が無限遠で，$1/r^3$ のように，あるいはそれよりもおそく減少するならば，（§124 の一般的な結果に従って）この積分は発散する．

次の興味ある事実に注意を向けよう．粒子の運動量 p および散乱角 θ は (126.12) の中に q を通じてのみ入っている．したがって，ボルン近似では散乱断面積は $p\sin(\theta/2)$ という組み合わせにおいてのみ p および θ に依存する．

任意の場 $U(x, y, z)$ の一般的な場合にもどり，小さい速度 ($ka\ll1$) および大きい速度 ($ka\gg1$) の極限の場合を考察しよう．

小さい速度に対しては，積分 (126.4) の中で $e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}\approx1$ と置くことができて，散乱振幅は

$$f=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int UdV \qquad (126.13)$$

となり，もしも $U=U(r)$ ならば

$$f=-\frac{2m}{\hbar^2}\int U(r)r^2dr \qquad (126.14)$$

となる．散乱はこの場合等方的であり，速度に依存しない．このことは §132 の一般的結果と一致している．

反対の極限の大きい速度の場合には，散乱は鋭く異方的であり，頂角 $\Delta\theta\sim 1/ka$ をもつ細い円錐の中への前方散乱が主である．実際に，この円錐の外では量 q は大きく，因子 $e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}$ は急速に振動する関数であって，それとゆっくり変

動する関数 U との積の積分はほとんどゼロである.

大きい q の値に対する断面積の減少の法則は一般的な形では定まらず，場の具体的な形に依存する．もしも場 $U=U(r)$ が $r=0$ に対し，あるいはある別の r の実数値に対してある特異点をもつならば，(126.12) の中の積分においてこれらの点の近くの領域が決定的な役割を果たし，断面積はベキ乗則に従って減少する．関数 $U(r)$ が特異点をもたず，偶関数でない場合にも同じことがあてはまる；積分で重要な役割を果たすのは，この場合，$r=0$ の近くの領域である．ところが，もしも $U(r)$ が r の偶関数ならば，積分は r の負の値にまで形式的に拡げることができる．すなわち変数 r の実軸のすべてにわたって積分できて，その後で（もしも $U(r)$ が実軸上に特異点をもたないならば）積分経路を複素平面内で動かして，もっとも近い複素特異点に《引掛かる》ようにすることができる．その結果大きい q に対して積分は指数関数の法則に従って減少する．しかしながら，この指数関数的に小さい量を計算するためには，ボルン近似は一般的にいって役に立たないことを考慮すべきである (§131をも参照).

円錐 $\Delta\theta\sim 1/ka$ の中で微分散乱断面積の値は基本的に速度に依存しないが，円錐の頂角が小さくなるに従って，（もしも積分 $\int d\sigma$ が一般に収束するならば）大きいエネルギーに対する全散乱断面積は減少する．すなわち全断面積は円錐によって切り取られる立体角，$(\Delta\theta)^2\sim 1/k^2a^2$ に比例して減少し，つまりエネルギーに逆比例して減少する.

衝突理論の物理的応用の多くの例で，散乱を特徴づける量として，積分

$$\sigma_{tr}=\int(1-\cos\theta)d\sigma \qquad (126.15)$$

があらわれるが，これはしばしば**輸送断面積**と呼ばれる．上に述べたことと同様の考察により，大きい速度に対してこの量はエネルギーの自乗に逆比例することがわかる.

問　題

1. 球状のポテンシャル井戸 ($r<a$ に対して $U=-U_0$, $r>a$ に対して $U=0$) による散乱断面積をボルン近似で求めよ.

解　(126.12) の中の積分を計算すると，次の結果に到達する：

$$d\sigma=4a^2\left(\frac{mU_0a^2}{\hbar^2}\right)^2\frac{(\sin qa-qa\cos qa)^2}{(qa)^6}do.$$

角度にわたる積分（それを行なうには，変数 $q=2k\sin(\theta/2)$ への変換を行ない，do を $2\pi qdq/k^2$ に置きかえると便利である）の結果，全散乱断面積は：

$$\sigma=\frac{2\pi}{k^2}\left(\frac{mU_0a^2}{\hbar^2}\right)^2\left[1-\frac{1}{(2ka)^2}+\frac{\sin 4ka}{(2ka)^3}-\frac{\sin^2 2ka}{(2ka)^4}\right].$$

極限の場合には，この式は

$$ka\ll 1 \text{ に対して}\qquad \sigma=\frac{16\pi a^2}{9}\left(\frac{mU_0a^2}{\hbar^2}\right)^2,$$

$$ka\gg 1 \text{ に対して}\qquad \sigma=\frac{2\pi}{k^2}\left(\frac{mU_0a^2}{\hbar^2}\right)^2$$

となる.

2.　場 $U=U_0e^{-r^2/a^2}$ に対して前問と同様の計算を行なえ.

解　計算は式 (126.7) を用いて，$\boldsymbol{q}$ の方向を座標軸の一つの方向に選ぶと便利である．その結果は：

$$d\sigma=\frac{\pi a^2}{4}\left(\frac{mU_0a^2}{\hbar^2}\right)^2e^{-q^2a^2/2}do.$$

また全断面積は

$$\sigma=\frac{\pi^2}{2k^2}\left(\frac{mU_0a^2}{\hbar^2}\right)^2(1-e^{2k^2a^2})$$

となる．これらの式の適用条件は，不等式 (126.1)，(126.2) で U のかわりに U_0 と置いたものにより与えられる．そればかりでなく，$d\sigma$ に対する式は，もしも指数関数の指数が大きければ適用されない[1].

3.　場 $U=\dfrac{\alpha}{r}e^{-r/a}$ に対して前問と同様の計算を行なえ.

解　(126.12) の中の積分の計算を行なうと：

$$d\sigma=4a^2\left(\frac{\alpha ma}{\hbar^2}\right)^2\frac{do}{(q^2a^2+1)^2}.$$

また全断面積は

$$\sigma=16\pi a^2\left(\frac{\alpha ma}{\hbar^2}\right)^2\frac{1}{4k^2a^2+1}$$

となる．これらの式の適用条件は (126.1)，(126.2) で U のかわりに α/a と置いたものにより得られる：$\alpha ma/\hbar^2\ll 1$ または $\alpha/\hbar v\ll 1$.

4.　中心対称場の散乱に対する位相 δ_l を，ボルン近似に対応する場合について求めよ.

解　場 $U(r)$ の中の運動の動径波動関数 $\chi=rR$ に対して，また自由運動の関数 $\chi^{(0)}$ に対して，次の方程式を得る ((32.10) 参照)：

---

1) この場合，摂動論の非適用性は，散乱振幅を2次近似で計算すれば容易にわかる（後の (130.13) 参照）：その式で指数関数の前にある因子は1次近似の項の中の係数に比べて小さいにもかかわらず，指数関数の負の指数は半分の大きさにすぎない.

$$\chi''+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2m}{\hbar^2}U\right]\chi=0,$$

$$\chi^{(0)''}+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi^{(0)}=0.$$

最初の方程式に $\chi^{(0)}$ を掛け，第２の方程式に χ を掛け，辺々相引き，r に関して積分すれば，($r=0$ で $\chi=0$ となる境界条件を考慮して) 次式を得る：

$$\chi'(r)\chi^{(0)}(r)-\chi(r)\chi^{(0)\prime}(r)=\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^r U\chi\chi^{(0)}dr.$$

U を摂動とみなして，この等式の右辺で $\chi\approx\chi^{(0)}$ と置くことができる．$r\to\infty$ に対して等式の左辺で漸近式 (33.12), (33.20) を用いることができる；また積分の中では厳密な式 (33.10) を代入する．その結果次式を得る：

$$\sin\delta_l\approx\delta_l=-\frac{\pi m}{\hbar^2}\int_0^\infty U(r)[J_{l+1/2}(kr)]^2rdr.$$

この式はまた (小さい δ_l に対して)．(123.11) に従ってボルンの散乱振幅 (126.4) をルジャンドル多項式で直接展開することによっても得られるはずである．

5.　速い粒子 ($ka\gg1$) に対して場 $U=\alpha/(r^2+a^2)^{n/2}$, $n>2$ における全散乱断面積をボルン近似で求めよ．

解　この場合散乱において基本的な役割を果たすのは，大きい角運動量 l をもつ部分散乱振幅であることがわかる．したがって断面積は式 (123.11) で l に関する和を積分に置きかえたものによって計算することができる．ボルン近似ではすべて $\delta_l\gg1$ であるので

$$\sigma\approx\frac{4\pi}{k^2}\int_0^\infty 2l\delta_l^2dl \tag{1}$$

となる．大きい l をもつ位相 δ_l は (124.1) で計算されて：

$$\delta_l=-\frac{\alpha m}{\hbar^2}\int_{l/k}^\infty\frac{dr}{(r^2+a^2)^{n/2}(k^2-l^2/r^2)^{1/2}}.$$

置換 $r^2+a^2=(a^2+l^2/k^2)/\xi$ により，積分はよく知られたオイラー積分に帰着され，その結果

$$\delta_l=-\frac{m\alpha k^{n-2}}{2\hbar^2(a^2k^2+l^2)^{(n-1)/2}}\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)}{\Gamma(n/2)} \tag{2}$$

を得る．積分 (1) は $l\sim ak\gg1$ の範囲で決められる．それにより，すでに行なった仮定が妥当であったことがわかる．積分の計算を行なうと次の結果を得る：

$$\sigma=\frac{\pi^2}{n-2}\left[\frac{\Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)}{\Gamma(n/2)}\right]^2\left(\frac{m\alpha}{k\hbar^2a^{n-2}}\right)^2 \tag{3}$$

(126.2) により，この場合ボルン近似の適用条件は不等式 $m\alpha/\hbar^2ka^{n-1}\ll1$ で与えられる．ここで $\sigma\sim k^{-2}$ の依存性に注目せよ．これは本文で一般的に述べたことと一致している．

6.　２次元の場 $U=U(x,z)$ における散乱振幅をボルン近似で求めよ；粒子の流れは

z 軸に沿って入射されるものとする．

解　§45 の 186 頁の脚注およびハンケル関数のよく知られた漸近式：

$$u\to\infty \text{ で}\qquad H_0^{(1)}(u)\approx\sqrt{\frac{2}{\pi u}}e^{i(u-\pi/4)}$$

を用いると，場の軸（y 軸）から大きい距離 R_0 における波動関数の補正に対する式

$$\psi^{(1)}\approx\frac{f(\theta)}{\sqrt{R_0}}e^{ikR_0}$$

を得る．ここで散乱振幅は

$$f(\theta)=-\frac{m}{\hbar^2\sqrt{2\pi k}}e^{i\pi/4}\int U(\boldsymbol{\rho})\exp(-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{\rho})d^2\rho$$

である．($\boldsymbol{\rho}=(x,z)$ は 2 次元の動径ベクトルであり，$d^2\rho=dxdz$，θ は xz 平面内での散乱角である)．2 次元の場合に散乱振幅は長さの平方根の次元をもち，散乱断面積 $d\sigma=|f|^2d\theta$ は長さの次元をもつ．

§ 127. 準古典的な場合

散乱の量子力学的理論から古典理論への極限移行がどのように行なわれるかを研究しよう．

散乱角 θ がゼロの場合を考察から除けば，厳密な量子力学的理論によって与えられる散乱振幅は (124.4) の形に書くことができる：

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)e^{2i\delta_l}. \tag{127.1}$$

準古典的な波動関数はその位相が大きい値をもつことによって特徴づけられることをわれわれは知っている．したがって，散乱の古典理論への極限移行に対して，大きい位相 δ_l が対応することをあらかじめ期待することは自然である．和 (127.1) の値は主として大きい l をもつ項によって決定される．したがって，$P_l(\cos\theta)$ を漸近式 (49.7) に置きかえることができて，それは次の形に書ける：

$$P_l(\cos\theta)\approx-\frac{i}{\sqrt{2\pi l\sin\theta}}\left\{\exp\left[i\left(l+\frac{1}{2}\right)\theta+i\frac{\pi}{4}\right]-\exp\left[-i\left(l+\frac{1}{2}\right)\theta-i\frac{\pi}{4}\right]\right\}.$$

この式を (127.1) に代入すると，

$$f(\theta)=\frac{1}{k}\sum_l\sqrt{\frac{l}{2\pi\sin\theta}}\left(\exp\left\{i\left[2\delta_l-\left(l+\frac{1}{2}\right)\theta-\frac{\pi}{4}\right]\right\}\right.$$
$$\left.-\exp\left\{i\left[2\delta_l+\left(l+\frac{1}{2}\right)\theta+\frac{\pi}{4}\right]\right\}\right) \tag{127.2}$$

を得る.

l の関数とみなされる指数関数因子は（その位相が大きいので）急速に振動する関数である. このことのために,（127.2）の和の大多数の項は互いに消し合う. 和は主として, 指数の一つが極値をもつのに近い l の値の領域, すなわち方程式

$$2\frac{d\delta_l}{dl}\pm\theta=0 \tag{127.3}$$

の根に近い l の値の領域によって決定される. この領域では,（指数はその極値の点の近傍でゆっくり変わるので）指数関数因子がほとんど一定の値を保ち, そのため互いに消し合わないようなたくさんの級数項が存在する.

準古典的な場合の位相 δ_l は, 場 $U(r)$ の中の準古典的波動関数の位相

$$\frac{\pi}{4}+\frac{1}{\hbar}\int_{r_0}^{r}\sqrt{2m[E-U(r)]-\frac{\hbar^2(l+1/2)^2}{r^2}}\,dr$$

と, 自由運動の波動関数の位相 $kr-\pi l/2$（§33 参照）との差が $r\to\infty$ で収束する極限として書くことができる（§124 参照). したがって：

$$\delta_l=\int_{r_0}^{\infty}\left[\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-U)-\frac{\hbar^2(l+1/2)^2}{r^2}}-k\right]dr+\frac{\pi}{2}\left(l+\frac{1}{2}\right)-kr_0. \tag{127.4}$$

この式を方程式 (127.3) に代入しなければならない. この積分の微分を求める場合に, 積分範囲の限界 r_0 もまた l に依存することを思い出さなければならない；しかしながら, これから得られる項 kdr_0/dl は, δ_l の中の項 $-kr_0$ の微分と消し合う. $\hbar(l+1/2)$ は粒子の角運動量である. 古典力学ではこれを $m\rho v$ の形に書くことができる；ここで ρ は**衝突パラメーター**, v は無限遠での粒子の速度である.

この代入を行なうと, その結果方程式 (127.3) は次の最終的な形をもつ：

$$\int_{r_0}^{\infty}\frac{\rho\,dr}{r^2\sqrt{1-\frac{U}{E}-\frac{\rho^2}{r^2}}}=\frac{\pi\mp\theta}{2}. \tag{127.5}$$

斥力場ではこの方程式は右辺の θ の前の符号がマイナスのときにのみ（ρ に対する）根をもち, 引力場ではプラスのときにのみ根をもつ.

方程式 (127.5) は, 衝突パラメーターによって散乱角を決定する古典的な方程式と厳密に同じである（第I巻『力学』§18 参照). 容易に確かめられるよ

うに，断面積に対しては古典的な表式が実際に得られる．

このためには（127.2）の指数を $l'=l-l_0(\theta)$ のベキで展開しよう．ここで $l_0(\theta)$ は方程式（127.3)-(127.5）によって決定される．とくに（127.2）の第1項をとりあげ，それに相応して（127.3）の下の符号をとろう（引力の場合)．(127.3) により

$$\left.\frac{d^2\delta_l}{dl^2}\right|_{l=l_0}=\frac{1}{2}\frac{d\theta}{dl_0}$$

に注意すると

$$i\left[2\delta_l-\left(l+\frac{1}{2}\right)\theta-\frac{\pi}{4}\right]\approx i\left[2\delta_{l_0}-\left(l_0+\frac{1}{2}\right)\theta-\frac{\pi}{4}\right]+\frac{i}{2}\frac{d\theta}{dl_0}l'^2$$

が得られる．(127.2) における l に関する和は，ここでは点 $l'=0$ の近傍の l' に関する積分に置きかえられる．ここで l' を複素変数とみなし，この点の近傍での積分径路は，指数の最急降の方向，すなわち $d\theta/dl_0$ の符号に依存して実軸と $\pi/4$ または $-\pi/4$ の角をなす方向に沿ってとろう．いいかえると，$l'=\xi\exp(\pm i\pi/4)$ と置き，ξ の実の値にわたって積分する；積分は急速に収束するために，積分を $-\infty$ から ∞ へ拡張することができる：

$$\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\left|\frac{d\theta}{dl_0}\right|\right)d\xi=\left(2\pi\left|\frac{dl_0}{d\theta}\right|\right)^{1/2}.$$

その結果次式を得る：

$$f(\theta)=\frac{1}{k}\left(\frac{l_0}{\sin\theta}\left|\frac{dl_0}{d\theta}\right|\right)^{1/2}\exp\left\{i\left[2\delta_{l_0}-\left(l_0+\frac{1}{2}\right)\theta-\frac{\pi}{4}\right]\right\}. \quad (127.6)$$

これから

$$d\sigma=|f|^2\cdot 2\pi\sin\theta d\theta=2\pi\frac{l_0}{k^2}\left|\frac{dl_0}{d\theta}\right|d\theta \quad (127.7)$$

が得られる．そして衝突パラメーター $\rho=l_0/k$ を用いると，古典的な式 $d\sigma=2\pi\rho d\rho$ が得られる．

このようなわけで，与えられた散乱角 θ をもつ古典的散乱の条件は，(127.3) が成り立つ l の値が大きく，したがって この l の値に対して δ_l もまた 大きい

ということでなければならない[1]．この条件は簡単な物理的意味をもっている．粒子が衝突パラメーター ρ をもって入射するときに，散乱角 θ をもつ古典的散乱についていえるためには，これらの値の量子力学的不確定性が比較的小さいことが必要である：$\Delta\rho\ll\rho$, $\Delta\theta\ll\theta$．散乱角の不確定性は $\Delta\theta\sim\Delta p/p$ の値の程度である；ここで p は粒子の運動量，Δp はその横成分の不確定性である．$\Delta p\sim\hbar/\Delta\rho\gg\hbar/\rho$ であるので，$\Delta\theta\gg\hbar/p\rho$ となり，したがって，あらゆる場合に

$$\theta\gg\frac{\hbar}{\rho mv} \tag{127.8}$$

となる．角運動量 $m\rho v$ を $\hbar l$ で置きかえると，$\theta l\gg1$ が得られ，これは条件 $\delta_l\gg1$ と同じである（そのわけは，(127.3) からわかるように $\delta_l\sim l\theta$ だからである）．

粒子の古典的散乱角は，《衝突時間》$\tau\sim\rho/v$ の間の運動量の横方向の増分 Δp と最初の運動量 mv との比として見積もることができる．場 $U(r)$ の中で距離 ρ にある粒子に働く力は $F=-dU(\rho)/d\rho$ である．したがって $\Delta p\sim F\rho/v$ となり，$\theta\sim\rho F/mv^2$ を得る．この見積もりは角度 $\theta\ll1$ の場合にのみ厳密に成り立つが，しかし $\theta\sim1$ のときでも値の程度を求めるために用いられる．この式を (127.8) に代入すると，次の形の準古典的散乱の条件が得られる：

$$|F|\rho^2\gg\hbar v. \tag{127.9}$$

この不等式は，$|U(\rho)|\lesssim E$ であるすべての ρ の値に対して成り立たなければならない．

得られた条件からいくつかの結論を引き出すことができる．もしも場 $U(r)$ が $1/r$ よりもはやく減少するならば，条件 (127.9) は十分大きい ρ に対してはあらゆる場合に成り立たなくなる．しかしながら，大きい ρ に対しては小さい θ が対応する；したがって，十分に小さい角度の散乱はあらゆる場合に古典的でない．これに反し，もしも場が $1/r$ よりもおそく減少するならば，小角散乱は古典的となる；この場合大きい角度での散乱が古典的となるかどうかは，小

1) (式 (127.5) で与えられる θ と ρ の関係は，一意的でないことがあり得る；すなわち θ の同一の値に，一つより多い ρ の値が対応する．その場合には振幅 $f(\theta)$ は l_0 のてきとうな値をもつ式 (127.6) の和で与えられる．関数 $\theta(\rho)$ の極値の点では，微分 $d\rho/d\theta$ およびそれにともなって古典的微分断面積 $d\sigma/do$ が無限大となる．この角の近傍では，古典的近似はもちろん成り立たない (問題2参照)．

さい距離での場の振舞いの性質に依存している．

クーロン場 $U=\alpha/r$ に対して，もしも $\alpha\gg\hbar v$ ならば条件 (127.9) は満たされている．これはクーロン場が摂動とみなされることができるのと反対の条件である．しかし偶然のことながら，クーロン場における散乱の量子的理論は，あらゆる場合に古典的理論と同じ結果を与えることが，あとでわかるであろう．

問　　題

1. 十分に大きい距離で $U=\alpha/r^n$（ここで $n>2$）の形をもつ場における準古典的散乱の全断面積を求めよ．

解　大きい l をもつ位相 δ_l が重要な役割を果たすことを考慮して，これらを (124.1) の式に基づいて計算しよう．

$$\delta_l=-\frac{m\alpha}{\hbar^2}\int_{l/k}^{\infty}\frac{dr}{r^n\sqrt{k^2-\frac{l^2}{r^2}}}=-\frac{m\alpha k^{n-2}}{2\hbar^2 l^{n-1}}\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)}{\Gamma(n/2)} \qquad (1)$$

（この積分の計算については§126の問題5を参照せよ）．(123.12) において和を積分に置きかえて，

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\int_0^{\infty}2l\sin^2\delta_l dl$$

と書く．積分を行なうために置換 $\delta_l=u$ を行ない，u に関して一度部分積分を行なうと，この積分は Γ-関数に帰着される．その結果次式を得る：

$$\sigma=2\pi^{n/(n-1)}\sin\left[\frac{\pi}{2}\left(\frac{n-3}{n-1}\right)\right]\Gamma\left(\frac{n-3}{n-1}\right)\left[\frac{\Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}\right]^{2/(n-1)}\left(\frac{\alpha}{\hbar v}\right)^{2/(n-1)} \qquad (2)$$

（$n=3$ のとき不定性はとかれて $\sigma=2\pi^2\alpha/\hbar v$ となる）．

この式の適用条件は主として $\delta_l\sim 1$ に対して $l\gg 1$ であると結論される；これから不等式

$$m\alpha k^{n-2}/\hbar^2\gg 1$$

が得られる．場 $U(r)$ は，積分 (1) で基本的な役割を果たす距離

$$r\sim l/k\sim(m\alpha/\hbar^2 k)^{1/(n-1)}$$

（l は $\delta_l\sim 1$ の関係から求められる）で，本問題の最初に仮定した形をもたなければならないという要請からもう一つの条件が生じる．もしもこの形が距離 $r\gg a$ でしか満たされないならば（ここで a は場の特徴的な大きさである），これから条件

$$m\alpha/\hbar^2 k a^{n-1}\gg 1$$

が得られる．これは許される速度の上限を設定する．この場合十分大きい速度のとき（条件 $m\alpha/\hbar^2 k a^{n-1}\ll 1$ のとき）は，$\sigma\propto k^{-2}$ の依存性がえられることに注意しよう（§126

の問題5参照).

2. 衝突パラメーター $\rho=l/k$ の関数としての古典的散乱角 $\theta(\rho)$ の極値の近傍における角度分布を求めよ.

解 関数 $\theta(l)$ がある値 $l=l_0$ で極値をもつことは, (127.3) によればこの点の近傍で位相 δ_l が

$$2\delta_l\approx 2\delta_{l_0}+\theta_0 l'+\frac{\alpha}{3}l'^3$$

の形を持つことを意味している. ここで $\theta_0=\theta(l_0)$, $l'=l-l_0$ (またここでも (127.3) の下の符号に相応する特別な場合を選んでいる). 定数 $\alpha<0$ または $\alpha>0$ はそれぞれ関数 $\theta(l)$ の極大または極小の場合に対応している. 散乱振幅に対しては (127.6) の代りに次式を得る:

$$|f(\theta)|=\frac{1}{k}\left(\frac{l_0}{2\pi\sin\theta_0}\right)^{1/2}\left|\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{i\left(-l'\theta'+\frac{\alpha}{3}l'^3\right)\right\}dl'\right|.$$

ここで $\theta'=\theta-\theta_0$ である. (b.3) のエアリ関数を用いて積分をあらわすと, 最終的に次の散乱断面積を得る[1]:

$$d\sigma=\frac{4\pi l_0}{\alpha^{2/3}k^2}\Phi^2\left(-\frac{\theta'}{\alpha^{1/3}}\right)d\theta'.$$

微分断面積 $d\sigma/d\theta'$ は古典的に到達不可能な散乱領域 ($\alpha<0$ のとき $\theta'>0$ または $\alpha>0$ のとき $\theta'<0$) の奥へ向かって減衰し, $\theta'=0$ の点より逆に向かってはゼロと徐々に減衰する振幅の間の振動を行なう. その極大値は $\theta'\alpha^{-1/3}=1.02$ のときに実現され, そのとき $\Phi^2=0.90$ である.

3. もしも古典的なふれ角 θ が $\rho=l_0/k$ のある有限な値に対してゼロになるとき, 準古典的な小角散乱の角度分布を求めよ.

解 この場合に仮定されている準古典的な散乱の意味は, $l_0\gg 1$ および $\delta_{l_0}\gg 1$ である. すると散乱において重要となるのは l_0 に近い l の値である. 小さい $l'=l-l_0$ に対しては

$$\delta_l\approx\delta_{l_0}+\frac{\beta}{2}l'^2$$

である (ここで (127.3) により $l'=0$ のとき $\theta=0$ である). この式は (127.1) に代入され, そして $P_l(\cos\theta)$ は (49.6) の形であらわされる. l に関する和はふたたび $l'=0$ の点のまわりの l' に関する積分に置きかえられる[2]:

$$f=\frac{l_0}{ik}\exp(2i\delta_{l_0})\int J_0(l\theta)\exp(i\beta l'^2)dl'.$$

積分は $l'\sim\beta^{1/2}$ の領域で決定される. 角 $\theta\ll\sqrt{\beta}$ に対しては, 関数 $J_0(l\theta)$ は積分記号の外に出して, $l=l_0$ のときのそれの値を用いることができる. 残りの積分は本文で説明さ

---

1) この種の散乱は虹の理論に出てくるので, **虹散乱**と呼ばれる.

2) 厳密に言うと, この振幅には衝突パラメーターが $\rho\to\infty$ である小角散乱の寄与に相当する項を付加しなければならない. この寄与は, しかしながら一般的にはこの振幅に比べて小さい.

れたようにして計算される．その結果次の断面積がえられる[1]：

$$d\sigma=\frac{\pi l_0^2}{\beta k^2}J_0^2(l_0\theta)do.$$

もしも古典的な散乱角が ρ の（ゼロでない）ある有限な値で π になるならば，π に近い角での散乱断面積に対しても同様の結果が得られる．

§ 128. 散乱振幅の解析的性質

散乱振幅のいくつかの重要な性質は，それを散乱される粒子のエネルギー E の関数とみなして考察することによって導くことができる；ここに E は，形式的に複素変数とみなされる．

無限遠で十分はやくゼロとなる場 $U(r)$ の中の粒子の運動を考察しよう；要求される減少のはやさの程度については後で述べる．以下の議論を簡単にするために，まず粒子の軌道角運動量 $l=0$ であるとみなそう．E の任意の与えられた値に対して $l=0$ をもつシュレーディンガー方程式の解である波動関数の漸近形は次の形に書ける：

$$\chi\equiv r\psi=A(E)\exp\left(-\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}r\right)+B(E)\exp\left(\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}r\right). \qquad (128.1)$$

そして E を複素変数とみなそう；このとき実の負の値 E に対して $\sqrt{-E}$ を正の値と定義しよう．波動関数はある定まった条件，たとえば条件 $\psi(0)=1$ によって規格化されていると仮定する．

(128.1) の第1項および第2項の中の指数関数因子は，実軸の左の部分 $(E<0)$ において実である；$r\to\infty$ に対して一方は減少し，他方は増大する．χ が実である条件から，関数 $A(E)$ および $B(E)$ は $E<0$ に対して実であることが導かれる；そのことから今度は，実軸に関して対称に配置された任意の2点において，これらの関数は複素共役の値をもつことが導かれる：

$$A(E^*)=A^*(E), \qquad B(E^*)=B^*(E). \qquad (128.2)$$

実軸の左半分から右半分へ，上の半平面を通って移行すれば，$E>0$ に対する波動関数の漸近式として次の形を得る：

$$\chi=A(E)e^{ikr}+B(E)e^{-ikr}, \qquad k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \qquad (128.3)$$

1）この散乱の型はルミネッセンス（後光）と呼ばれ，ある種の気象学的現象の理論に出てくる．

反対にもしも下の半平面を通って移行したならば，次式を得たであろう：

$$\chi=A^*(E)e^{-ikr}+B^*(E)e^{ikr}.$$

χ は E の一意関数でなければならないので，このことは

$$E>0 \text{ に対して}\qquad A(E)=B^*(E) \qquad (128.4)$$

であることを意味する（この関係はまた $E>0$ に対して χ が実であることから直接導くこともできる）．しかしながら，(128.1) における根 $\sqrt{-E}$ が一意でないために，係数 $A(E)$ および $B(E)$ それ自身は一意でない．この非一意性を避けるために，複素平面に実軸の右半分に沿って切れ目を入れることにしよう．切れ目の存在により $\sqrt{-E}$ は一意となり，それによって関数 $A(E)$ および $B(E)$ を一意的に決定することが可能になる．この場合，切れ目の上端および下端において，これらの関数は複素共役の値をとる（式 (128.3) において $A(E)$ および $B(E)$ は切れ目の上端の値をとっている）．

上に述べたように切れ目を入れた複素平面はリーマン面の**物理的分岐面**と呼ばれる．われわれの用いた定義によれば，この分岐面のいたるところで

$$\mathrm{Re}\sqrt{-E}>0 \qquad (128.5)$$

である．たとえば切れ目の上端で，このようにして定義された $\sqrt{-E}$ は $-i\sqrt{E}$ となる[1]．

(128.3) において因子 e^{ikr} および e^{-ikr}，したがって，χ の中の二つの項は同程度の大きさの量である；(128.3) の形の漸近式は，それゆえいつも妥当である．物理的分岐面の残りのいたるところで，(128.1) の第1項は（(128.5) のため）$r\to\infty$ に対して指数関数的に減少し，第2項は増大する．したがって，(128.1) の中の二つの項は異なる程度の大きさであり，波動関数の漸近形としてこの式は許されない，その式の中の大きい項に比べて小さい項は許し難いほどに精度が高すぎるかもしれないからである．式 (128.1) が許されるためには，大きい項に対する小さい項の比がポテンシャル・エネルギーの相対的な大

1）以下本節ではいつも散乱振幅の性質を物理的分岐面で考察する．しかしながら，後でリーマン面のもう一つの《非物理的分岐面》をも考察しなければならない場合に出会うであろう（§ 134 参照）．この分岐面では

$$\mathrm{Re}\sqrt{-E}<0 \qquad (128.5a)$$

である．実軸の右半分から非物理的分岐面への移行は，下に向かって切れ目を通過することによって直接実現される．

きさの程度 (U/E) よりも小さくてはならない．この U/E はシュレーディンガー方程式において漸近領域へ移行するときに無視されるものである．いいかえると，場 $U(r)$ は次の条件を満足しなければならない：

$U(r)$ は，$r\to\infty$ に対して

$$\exp\left(-\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar}r\,\mathrm{Re}\sqrt{-E}\right) \tag{128.6}$$

よりもはやく減少する．

この条件が満たされている場合には，(128.1) の形の漸近式は物理的分岐面のいたるところで成り立つ．それはまた，有限の係数をもつ方程式の解であるので，E に関して特異点をもたない．このことは関数 $A(E)$ および $B(E)$ が，$E=0$ の点を除いて物理的分岐面のいたるところで正則であることを意味する；この $E=0$ の点は切れ目の始まる点であって，これらの関数の分岐点である．

場 $U(r)$ の中の粒子の束縛状態は $r\to\infty$ でゼロとなる波動関数に対応している．このことは (128.1) の中の第2項が存在してはならないこと，すなわち離散エネルギー準位が関数 $B(E)$ のゼロ値に対応することを意味している．シュレーディンガー方程式は実の固有値しかもたないので，$B(E)$ のすべてのゼロ値は物理的分岐面の上で実である（そしてそれは実軸の左の部分に配置されている）．

$E>0$ に対する関数 $A(E)$ および $B(E)$ は場 $U(r)$ における散乱振幅と直接関係している．実際に，(128.3) を (33.20) の形に書かれた χ の漸近式

$$\chi=\mathrm{const}\cdot\left[e^{i(kr+\delta_0)}-e^{-i(kr+\delta_0)}\right] \tag{128.7}$$

と比較すると，

$$-\frac{A(E)}{B(E)}=e^{2i\delta_0(E)} \tag{128.8}$$

となることがわかる．角運動量 $l=0$ をもつ散乱振幅は，(123.15) により

$$f_0=\frac{1}{2ik}(e^{2i\delta_0}-1)=\frac{\hbar}{2\sqrt{-2mE}}\left(\frac{A}{B}+1\right); \tag{128.9}$$

ここで A および B は切れ目の上端での値をとる．

つぎに散乱振幅を E の関数として，物理的分岐面のあらゆるところで考察すれば，離散エネルギー準位はこの関数の単なる極であることがわかる．もしも場 $U(r)$ が条件 (128.6) を満たすならば，上に述べた議論により，散乱振幅は

それ以外の特異点をもたない[1].

散乱振幅がある離散準位 $E=E_0<0$ においてもつ極に関して，散乱振幅の留数を計算しよう．そのためには，関数 χ およびそれのエネルギーに関する微係数が満足する方程式を次のように書く：

$$\chi''+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\chi=0, \qquad \left(\frac{\partial\chi}{\partial E}\right)''+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\frac{\partial\chi}{\partial E}=-\frac{2m}{\hbar^2}\chi.$$

前者に $\partial\chi/\partial E$ を掛け，後者に χ を掛け，辺々相引き，r に関して積分すると，次式が得られる：

$$\chi'\frac{\partial\chi}{\partial E}-\chi\left(\frac{\partial\chi}{\partial E}\right)'=\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^r\chi^2dr. \qquad (128.10)$$

$E=E_0$ および $r\to\infty$ に対してこの式を適用する．等式の右辺の積分は，もしも束縛状態の波動関数がふつうの条件 $\int\chi^2dr=1$ によって規格化されているならば，$r\to\infty$ に対して1となる．ところが左辺では χ に (128.1) を代入し，ここで点 $E=E_0$ の近傍では

$$A(E)\approx A(E_0)\equiv A_0, \qquad B(E)\approx(E+|E_0|)\left.\frac{dB}{dE}\right|_{E=E_0}\equiv\beta(E+|E_0|)$$

であることを考慮する．その結果次式が得られる：

$$\beta=-\frac{1}{A_0\hbar}\sqrt{\frac{m}{2|E_0|}}.$$

これらの式を用いると，点 $E=E_0$ の近傍で散乱振幅における主な項（これは $l=0$ に対する振幅と同じである）は次の形をもつことがわかる：

$$f=-\frac{\hbar^2A_0^2}{2m}\frac{1}{E+|E_0|}. \qquad (128.11)$$

このようなわけで，離散準位における散乱振幅の留数は，対応する定常状態の規格化された波動関数の漸近式

$$\chi=A_0\exp\left(-\frac{\sqrt{2m|E_0|}}{\hbar}r\right) \qquad (128.12)$$

における係数 A_0 によって決定される．

散乱振幅の解析的性質の研究にもどって，条件 (128.6) が満足されない場合

1) このことは $E=0$ の点を除いてである．その点は関数 $A(E)$ および $B(E)$ の上述の特異性のための特異点である．しかしながら，散乱振幅は $E\to0$ に対して有限にとどまる (§ 132 参照)．以下では，簡単のためにいちいちこのことわりをしない．

を考察しよう．このような場においては，(128.1) のうちで増大する項のみが，物理的分岐面のいたるところでシュレーディンガー方程式の解の漸近形の正しい部分を与えている．このことにより，関数 $B(E)$ は特異点をもたないということを前と同じく主張できる．

ところが関数 $A(E)$ はこれらの条件の下では，実軸の右半分で χ の漸近式の中の係数をあらわす関数の解析接続としてのみ複素平面内で決定できる；実軸の右半分では，χ の中の二つの項はともに許される．しかしこのような接続は，一般的にいって，接続を切れ目の上側から行なうか下側から行なうかによって，異なる結果を与えることになる．一意性を得るためには，$A(E)$ を上および下の半平面においてそれぞれ実軸の右半分の上側および下側から行なう解析接続として定義しなければならない；この場合，切れ目は，ふつうは，実軸のすべてにわたって入れなければならない．このようにして定義された関数は前と同じく $A(E^*)=A^*(E)$ の性質をもつが，しかし一般的にいって，実軸の右半分でも左半分でも実でない．それはまた，原理的に特異点をもつことができる．

しかし，それにもかかわらず，関数 $A(E)$ が物理的分岐面の上で特異点をもたず，それでいて条件 (128.6) は満足されていないような，ある種の場が存在することを示そう．

そのためには，E の与えられた(複素) 値に対して，χ を複素変数 r の関数とみなそう．このとき E の値を上の半平面に限っても十分である．そのわけは，二つの半平面における関数 $A(E)$ の値は互いに複素共役だからである．Er^2 が実の正数であるような r の値に対して，波動関数 (128.1) の中の二つの項は同じ程度の大きさである；すなわち，無限遠でゼロに収束する任意の場 $U(r)$ に対して，χ の漸近式の中の二つの項が許される場合が，$E>0$ および実の r のときに成り立つような状況にもどっている．したがって，$Er^2>0$ であるような線に沿って $r\to\infty$ となるときに，$U(r)\to 0$ となるような E の値に対して，$A(E)$ は特異点をもつことができないということができる．E が上の半平面においてあらゆる値をとるときに，条件 $Er^2>0$ は r の複素平面の右下の象限を選び取ることになる．このようなわけで，$U(r)$ が次に述べる条件を満足する場合においても，$A(E)$ は物理的分岐面の上で特異点をもたないという結論に到達す

る[1]：

$$\text{右の半平面で}\ r\to\infty\ \text{のとき}\quad U(r)\to 0. \qquad (128.13)$$

(エリ・デ・ランダウ Л. Д. Ландау, 1961)

条件 (128.6) および (128.13) は非常に広い範囲の場を包含している．したがって，散乱振幅はふつう二つの半平面の上で特異点をもたないということができる．ところが左の半軸（これはその（左半軸の）上に切れ目がない場合には，物理的分岐面の一部をなしている）の上で，散乱振幅は束縛状態のエネルギーに対応する極をもっている；切れ目がある場合には，ここに別の特異点があらわれ得る．

このようなことは，たとえば

$$U=\text{const}\cdot r^n e^{-r/a} \qquad (128.14)$$

の形の場に対して成り立つ（ここで n は任意である）．左の半軸の線分 $0<-E<\hbar^2/8ma^2$ の上では条件 (128.6) が満たされており，したがってその上に切れ目がなくてもよく，また散乱振幅は束縛状態に対応する極のみをここにもっている．左の半軸の残りの部分には，**よけいな極**およびその他の特異点が存在し得る (S. T. Ma, 1946)．これらの特異点があらわれるわけは次のとおりである．E が左の半軸の下へ移るやいなや，$Er^2>0$ であるような線に沿って $r\to\infty$ となるとき，関数 (128.14) はゼロに収束しなくなる（すなわち，上記の線が r の複素平面の虚軸の左へ移るからである）．

つぎに，$|E|\to\infty$ のときの散乱振幅の解析的性質を考察しよう．実軸に沿って $E\to+\infty$ となるとき，ボルン近似が成り立ち，散乱振幅はゼロに収束する．上に述べた議論によれば，このような状況が起こるのは，もしもこの場合 $Er^2>0$ であるような r の複素値を考慮するならば，E が複素平面で任意の直線 $\arg E=\text{const}$ に沿って無限大になるときにである．直線 $\arg r=-\dfrac{1}{2}\arg E$ に沿って $r\to\infty$ となるとき $U\to 0$ となり，またこの直線上で $U(r)$ がいかなる特異点ももたないならば，ボルン近似の適用条件が満足されて，散乱振幅は前と同じくゼロに収束する．$\arg E$ が 0 から π までのあらゆる値をとるときに，

1) 実軸の上で $U(r)$ は実であるため，$U(r^*)=U^*(r)$ が成り立つ；したがって，右下の象限で条件 (128.13) が満たされるということは，自動的に右の半平面のすべてで同じ条件が満たされることを意味する．

$\arg r$ は 0 から $-\pi/2$ までの値をとる.

結果として次の結論に到達する. もしも関数 $U(r)$ が r の右の半平面で特異点をもたず, 無限遠でゼロに収束するならば, 散乱振幅は E 平面のあらゆる方向に無限遠でゼロに収束する.

上で述べたことはすべて角運動量 $l=0$ をもつ散乱についてであったが, 実際に上の結果はゼロでない任意の角運動量をもつ散乱の部分振幅に対しても成り立つ. 導き方の上での差異は, χ の漸近式の中の因子 $e^{\pm ikr}$ のかわりに自由運動の厳密な動径波動関数 (33.16) を書かなければならない点だけである[1].

$l\neq0$ の場合には, 式 (128.9) および (128.11) において若干の変更を加えなければならない. (128.7) のかわりには式

$$\chi_l=rR_l=\text{const}\cdot\left\{\exp\left[i\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)\right]-\exp\left[-i\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)\right]\right\} \qquad (128.15)$$

を用い, ((123.15) によって定義される) 部分振幅 f_l に対して次式を得る:

$$f_l=\frac{\hbar}{2\sqrt{-2mE}}\left[(-1)^l\frac{A}{B}+1\right]. \qquad (128.16)$$

角運動量 l をもつ準位 $E=E_0$ の近くの散乱振幅の中の主な項は, (128.11) のかわりに次式で与えられる.

$$f\approx(2l+1)f_lP_l(\cos\theta)=(-1)^{l+1}\frac{\hbar^2A_0^2}{2m}\frac{1}{E+|E_0|}(2l+1)P_l(\cos\theta). \qquad (128.17)$$

§ 129. 分　散　式

前節では, 与えられた l の値をもつ部分散乱振幅の解析的性質を研究した. これらの性質は,《よけいな》特異点および無限遠での非正則性が出現するかもしれないために複雑になっているのを見た. 与えられた散乱角の値に対してエネルギーの関数と見なされる全振幅もまた明らかにこのような性質をもっている. しかしながら, 散乱角がゼロの散乱振幅は例外をなしている. これから示すように, その解析的性質はずっと簡単である.

散乱される粒子の波動関数に対するシュレーディンガー方程式を次の形

---

1) これらの関数の極限の形 (33.17) を用いることができるのは $E>0$ に対してのみである; 残りの E 平面では χ の中の二つの項が異なる程度の大きさをもつので, これらの極限の式を用いるときには χ の誤差を伴い, それは, 一般的にいって, シュレーディンガー方程式において U を無視することに対応する誤差よりも大きい.

$$\triangle\psi+k^2\psi=\frac{2mU}{\hbar^2}\psi \tag{129.1}$$

に書いて，われわれはそれを右辺がゼロでない波動方程式であるとみなす，つまり電気力学で知られている遅延ポテンシャルの方程式であると形式的にみなすことにする.

中心から大きい距離 R_0 におけるある方向 $\boldsymbol{k}'$ への《放射》を記述するこの方程式の解は，よく知られているように次の形をもつ（第Ⅱ巻『場の古典論』§66 参照）：

$$\psi_{\mathrm{sc}}=-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikR_0}}{R_0}\int\frac{2mU}{\hbar^2}\psi e^{-i\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r}}dV. \tag{129.2}$$

いまの場合，この式は散乱される粒子の波動関数をあらわし，e^{ikR_0}/R_0 の係数は散乱振幅 $f(\theta, E)$ である．とくに $\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}$ と置くと（$\boldsymbol{k}$ は入射粒子の波動ベクトル），散乱角ゼロの散乱振幅を得る：

$$f(0,E)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int U\psi e^{-ikz}dV \tag{129.3}$$

（z 軸は $\boldsymbol{k}$ の方向にとった)．この式はもちろん形式的な意味しかもたない；なぜならば，被積分関数に未知の波動関数がふたたび入っているからである．しかしながらそれは，エネルギー E の関数としての量 $f(0,E)$ の解析的性質に関して一定の結論を与えることを可能にする[1].

被積分関数の中にある関数 ψ は大きい r に対して二つの部分から成る；つまり入射波と発散波から成る．後者は e^{ikr} に比例するので，積分の対応する部分は被積分関数の中に $e^{ik(r-z)}$ を含んでいる．他方，（右の半軸に沿った切れ目の上端から）複素平面に移行するとき，ik は $-\sqrt{-2mE}/\hbar$ に置きかえられ，そして，物理的分岐面のいたるところで $\mathrm{Re}\sqrt{-E}>0$ である．$r\geqq z$ であるので，$\mathrm{Re}\,[ik(r-z)]<0$ であり，積分はいかなる複素数 E に対しても収束する．ψ の中の入射波についていえば，それは e^{ikz} に比例するので，積分の対応する部分において指数因子は一般に打ち消されて，その結果この部分もまた収束する.

積分（129.3）の中の関数 ψ はいかなる複素数 E に対してもシュレーディンガー方程式の解として一意的に決定され，これは平面波の他に（$r\to\infty$ で）減

1）もちろん，場 $U(r)$ は $r\to\infty$ に対して十分はやく減少するため，（$E>0$ に対して）$f(0,E)$ が一般に存在することを仮定している（§124 参照).

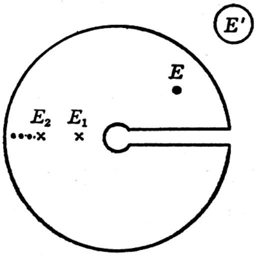
衰する部分のみを含んでいる．したがって，収束する積分 (129.2) のすべてもまた一意的に決定され，それゆえその特異性は ψ が無限大となる結果としてのみ起こることができる．このようなことはエネルギーの離散準位において起こる[1]．

また容易にわかるように，$|E|\to\infty$ のとき $f(0,E)$ は有限にとどまる．大きい $|E|$ に対して，シュレーディンガー方程式 (129.1) の中の U をもつ項を無視できて，ψ の中には平面波のみが残る：$\psi\sim e^{ikz}$．その結果，積分 (129.2) は

$$f(0,\infty)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int UdV$$

となり，当然のことながら，これは散乱角ゼロ ($q=0$) のボルンの散乱振幅 (126.4) と一致する；それを $f_B(0)$ と書くことにしよう．

このようなわけで次の結論に到達する．散乱角ゼロの散乱振幅は，エネルギーの離散準位に対応する左半分の実軸上の極を除いて，物理的分岐面のいたるところで（無限遠を含めて）正則である[2]．



第 46 図

第46図に示した経路に沿ってとられた積分

$$\frac{1}{2\pi i}\int_C\frac{f(0,E')-f_B}{E'-E}dE' \qquad (129.4)$$

を考察しよう．この経路は，無限に離れた円周および右の半軸に沿った切れ目の回りの迂回から成り立っている．円周に沿っての積分は，$f(0,\infty)-f_B=0$ であるためゼロとなる．ところが，切れ目の両側に沿っての積分は

1) 誤解を避けるために，次のことを強調しておく，ここで問題にしているのは系の全波動関数 ψ であって，これはその漸近形の中の平面波の係数が1となるような条件で規格化されている ((123.3) 参照)．ところが前節では，l の定まった値に対応する波動関数の部分 (ψ_l) を考察したが，この ψ_l はある任意の条件で規格化されていると仮定した．もしも全関数 ψ を関数 ψ_l で展開すると，後者は ψ の中に $1/B_l$ に比例した係数をもってあらわれる；たとえば $l=0$ をもつ関数 (128.3) は，ψ の中に

$$\frac{\text{const}}{r}\frac{1}{B}[(A+B)e^{ikr}-2iB\sin kr]$$

の形であらわれなければならない．したがって ψ は関数 $B_l(E)$ のゼロにおいて，つまりエネルギーの離散準位で無限大となる．

2) ここに示した証明の考え方はエリ・デ・ファデエフ (Л. Д. Фаддеев, 1958) による．

$$\frac{1}{\pi}\int_0^\infty \frac{\mathrm{Im}\, f(0, E')}{E'-E} dE'$$

を与える；§128で採用された定義に従えば，Eの実の正値に対する物理的散乱振幅は切れ目の上側で与えられており，下側では複素共役の値をとるということがここで考慮されている．

他方コーシーの定理によれば，積分 (129.4) は，$f(0, E)-f_B$ と関数 $f(0, E')/(E'-E)$ のあらゆる極 $E'=E_n$ における被積分関数の留数 R_n との和に等しい．ここで E_n はエネルギーの離散準位である；これらの留数は式 (128.17) を用いて決定され，その値は

$$R_n = \frac{d_n}{E_n - E}, \qquad d_n = -(-1)^{l_n}(2l_n+1)\frac{\hbar^2 A_{0n}^2}{2m} \tag{129.5}$$

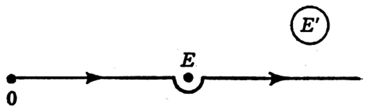
である (l_n はエネルギー E_n をもつ状態の角運動量である)．

したがって次式が得られる：

$$f(0, E) = f_B + \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \frac{\mathrm{Im}\, f(0, E')}{E'-E} dE' + \sum_n \frac{d_n}{E-E_n}. \tag{129.6}$$

このいわゆる**分散関係**は，$E>0$ に対する $f(0, E)$ の虚部の値に基づいて，物理的分岐面の任意の点における $f(0, E)$ を決定する (D. Y. Wong, 1957, N. N. Khuri, 1957)．

もしも点 E が切れ目の上側に無限に接近するならば，(129.6) の中の実軸に沿っての積分は極 $E'=E$ のまわりを下に迂回するようにとらなければならない；もしも無限に小さい半円周に沿ってこの迂回がなされるならば (第47図)，積分の対応する部分は等式 (129.5) の右辺で $i\,\mathrm{Im}\, f(0, E)$ の値を与え，0 から ∞ までの残りの積分は主値をとるものとしなければならない．その結果次式を得る：



第 47 図

$$\mathrm{Re}\, f(0, E) = f_B + \frac{1}{\pi}\,\mathrm{P}\int_0^\infty \frac{\mathrm{Im}\, f(0, E')}{E'-E} dE' + \sum_n \frac{d_n}{E-E_n}. \tag{129.7}$$

これは $E>0$ に対して，角度ゼロの散乱振幅の実部をその虚部に基づいて決定する．後者は，(125.9) によれば，全散乱断面積と直接結ばれていることが思い出される．

§ 130. 運動量表示における散乱振幅

散乱振幅という概念には，散乱される粒子の初めと終りの運動量の方向しか含まれていない．したがって当然ながらこの概念に到達するのに，一般に散乱の全過程に空間的な配置の問題が入らないような運動量表示における散乱問題の定式化を用いても可能である．これがどのように行なわれるかを示そう．

まず最初に出発点のシュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\psi(\boldsymbol{r})+[U(\boldsymbol{r})-E]\psi(\boldsymbol{r})=0 \qquad (130.1)$$

で座標波動関数を運動量波動関数，すなわちフーリエ成分

$$a(\boldsymbol{q})=\int\psi(\boldsymbol{r})e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}}dV \qquad (130.2)$$

に変えて運動量表示に変換しよう．逆には

$$\psi(\boldsymbol{r})=\int a(\boldsymbol{q})e^{i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}}\frac{d^3q}{(2\pi)^3} \qquad (130.3)$$

である．

(130.1) に $e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}}$ を掛けて，それを dV に関して積分する．第1の項は2回部分積分を行なったあとに，

$$\int e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}}\triangle\psi(\boldsymbol{r})dV=\int\psi(\boldsymbol{r})\triangle e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}}dV=-\boldsymbol{q}^2a(\boldsymbol{q})$$

となる．第2の項は，それに (130.3) の形の $\psi(\boldsymbol{r})$ を代入すると

$$\int U(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}}dV=\iint U(\boldsymbol{r})e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}}a(\boldsymbol{q}')e^{i\boldsymbol{q}'\boldsymbol{r}}dV\frac{d^3q'}{(2\pi)^3}$$

$$=\int U(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{q}')a(\boldsymbol{q}')\frac{d^3q'}{(2\pi)^3}$$

となる．ここで $U(\boldsymbol{q})$ は場 $U(\boldsymbol{r})$ のフーリエ成分

$$U(\boldsymbol{q})=\int U(\boldsymbol{r})e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}}dV$$

である[1]．このようにして運動量表示におけるシュレーディンガー方程式は

$$\left(\frac{\hbar^2q^2}{2m}-E\right)a(\boldsymbol{q})+\int U(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{q}')a(\boldsymbol{q}')\frac{d^3q'}{(2\pi)^3}=0 \qquad (130.4)$$

の形をもつ．これは微分方程式でなく，積分方程式であることに注意せよ．

運動量 $\hbar\boldsymbol{k}$ をもつ粒子の散乱を記述する波動関数を

---

1) 記号の便宜上，$\boldsymbol{q}$ はフーリエ成分の添字ではなく，引数の形に書くことにする．

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})=e^{i\boldsymbol{kr}}+\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \tag{130.5}$$

の形に書こう． ここで $\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ は（$r\to\infty$ で）発散球面波の漸近形をもつ関数である．それのフーリエ成分は

$$a_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{q})=(2\pi)^3\delta(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k})+\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{q}) \tag{130.6}$$

であり，(130.4) に代入すると関数 $\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{q})$ に対する次の方程式が導かれる[1]：

$$\frac{\hbar^2}{2m}(k^2-q^2)\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{q})=U(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k})+\int U(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{q}')\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{q}')\frac{d^3q'}{(2\pi)^3}. \tag{130.7}$$

この方程式は，$\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{q})$ の代りに次の定義式による別の未知の関数を導入してうまく変換される：

$$\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{q})=\frac{2m}{\hbar^2}\frac{F(\boldsymbol{k},\boldsymbol{q})}{q^2-k^2-i0} \tag{130.8}$$

これによって方程式 (130.7) の係数における $q^2=k^2$ での特異性は取り除かれて，方程式は次の形をもつ：

$$F(\boldsymbol{k},\boldsymbol{q})=-U(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k})-\frac{2m}{\hbar^2}\int\frac{U(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{q}')F(\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}')}{q'^2-k^2-i0}\frac{d^3q'}{(2\pi)^3} \tag{130.9}$$

項 $i0$（これは $\delta\to+0$ における $i\delta$ の極限を意味する）は (130.9) における積分にはっきりとした意味を与えるために，(130.8) に導入されたものである．それによって $q'^2=k^2$ の極を迂回する方法が定められる（§ 43 参照），実際にこのような迂回の方法が関数

$$\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})=\frac{2m}{\hbar^2}\int\frac{F(\boldsymbol{k},\boldsymbol{q})e^{i\boldsymbol{qr}}}{q^2-k^2-i0}\frac{d^3q}{(2\pi)^3} \tag{130.10}$$

の要求される漸近形に対応することを示そう．

このためには，$d^3q=q^2dqdo_{\boldsymbol{q}}$ と書き，まず最初に $do_{\boldsymbol{q}}$ に関する，すなわち $\boldsymbol{r}$ に対するベクトル $\boldsymbol{q}$ の方向に関する積分を行なおう．このような形の積分はすでに，(125.2) の第 1 項の変換で行なっており，その結果（大きい r の領域で）次式が導かれる：

$$\chi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})=-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{2\pi i}{r}\int_0^\infty\frac{F(\boldsymbol{k},q\boldsymbol{n}')e^{iqr}-F(\boldsymbol{k},-q\boldsymbol{n}')e^{-iqr}}{q^2-k^2-i0}\frac{qdq}{(2\pi)^3}$$

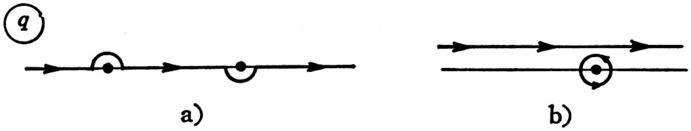
（ここで $\boldsymbol{n}'=\boldsymbol{r}/r$ である）または

---

1) δ-関数の性質のために，積 $(q^2-k^2)\delta(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k})$ は任意の関数 $f(\boldsymbol{q})$（$\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}$ で特異性をもたない）を掛けて d^3q で積分するとゼロとなる．この意味で積 $(q^2-k^2)\delta(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k})\equiv0$ となる．

$$\chi_k(\boldsymbol{r}) = -\frac{im}{2\pi^2\hbar^2 r}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{F(\boldsymbol{k}, q\boldsymbol{n}')e^{iqr}qdq}{q^2-k^2-i0}$$

被積分式は点 $q=k+i0$ および $q=-k-i0$ で極をもつ． これらの点は（複素数 q 平面上の）積分でそれぞれ下および上を迂回される（図 48 a)）． この積分



第 48 図

径路は上の半平面に移されて，実軸に平行な直線 および 極 $q=k$ をとりまく閉じたループに置きかえられる（図 48 b)）．直線に沿っての積分は（被積分式に因子 $\exp(-r\,\mathrm{Im}\,q)$ があることを考慮して）$r\to\infty$ で 0 となるが，閉じたループに沿っての積分は極 $q=k$ における被積分式の留数（に $2\pi i$ を掛けたもの）によって決定される．最終的には

$$\chi_k(\boldsymbol{r}) = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}F(k\boldsymbol{n}, k\boldsymbol{n}') \tag{130.11}$$

が得られる（$\boldsymbol{n}$ は $\boldsymbol{k}$ の方向の単位ベクトル）． われわれは波動関数の要求される漸近形を得た．そして散乱振幅は

$$f(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{n}') = \frac{m}{2\pi\hbar^2}F(k\boldsymbol{n}, k\boldsymbol{n}') \tag{130.12}$$

である．このようにして散乱振幅は，積分方程式（130.9）を満足する関数 $F(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{q})$ の $q=k$ における値によって決定される．

摂動論が適用できる場合には，方程式 (130.9) は遂次代入法によって容易に解ける． 1次近似では積分項をまったく無視して，$F(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{q}) = -U(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k})$ を得る． 次の近似では積分項の中で1次近似の $F(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{q})$ の表式を代入する；すると散乱振幅 (130.12) に対しては（変数の若干の変更を行なって）次式を得る：

$$f(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{n}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left\{U(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}) + \frac{2m}{\hbar^2}\int\frac{U(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}'')U(\boldsymbol{k}''-\boldsymbol{k})}{k^2-k''^2+i0}\frac{d^3k''}{(2\pi)^3}\right\}. \tag{130.13}$$

ここで $\boldsymbol{k}=k\boldsymbol{n}$, $\boldsymbol{k}'=k\boldsymbol{n}'$ である． 第1項は1次ボルン近似の式（126.4）と同じ

であるが，第2項は散乱振幅への2次近似の寄与を与えている[1]．

(130.13) からすでに§126で述べた状況，すなわちすでに2次近似で散乱振幅は (126.8) の対称性を失っているということが明らかである．一見したところ，(130.13) における積分項は初めおよび終りの状態の置換に対してもまた対称であるように見える．しかしながら実際には，複素共役表示へ移行すると積分路（極の迂回の方向）が変わるためにこのような対称性は存在しない．

§ 131. 大きいエネルギーにおける散乱

もしもポテンシャル・エネルギーが $\hbar^2/ma^2$ に比べて小さくないならば（ここでふつうのように，a は場の作用の範囲である），散乱される粒子のエネルギーが十分大きくて，

$$|U| \ll E \sim \frac{\hbar^2}{ma^2}(ka)^2 \tag{131.1}$$

が成り立ち，それと同時に

$$|U| \gtrsim \frac{\hbar^2}{ma^2}ka = \frac{\hbar v}{a} \tag{131.2}$$

が成り立つような場合が可能である．ここでもちろん

$$ka \gg 1 \tag{131.3}$$

が仮定されている．この場合には，ボルン近似が適用されないようなはやい粒子の散乱を扱うことになる（条件 (126.1), (126.2) のどちらも満足されない)．

このような場合を研究するためには，(45.9) の形の波動関数の式を用いることができる：

$$\psi = e^{ikz}F(\boldsymbol{r}), \qquad F(\boldsymbol{r}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar v}\int_{-\infty}^{z} U dz\right) \tag{131.4}$$

これが適用できるためには条件 $|U| \ll E$ が十分である．§45で注意したように，この式は $z \ll ka^2$ のときにのみ成り立つ；したがって，それは漸近式 (123.3) が成り立つような距離にまでただちに拡張できない．しかしながら，このことは必要ではない：散乱振幅を計算するためには，$a \ll z \ll ka^2$ であるような

---

1) この結果はもちろん運動量表示へ移行しなくても容易に得ることができる．2次近似の式が1次近似の式と異なるのが，$U(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})$ を (130.13) の波括弧の表式に置きかえた点であるという事実は，式 (43.1) を (43.6) と比べれば明らかである．

z の距離における波動関数を知れば十分である；この場合，$\boldsymbol{F(r)}$ の中の指数の中の積分は ∞ までも拡張できる：

$$\psi = e^{ikz}S(\boldsymbol{\rho}). \tag{131.5}$$

ここで記号

$$S(\boldsymbol{\rho}) = \exp\left[2i\delta(\boldsymbol{\rho})\right], \qquad \delta(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{1}{2\hbar v}\int_{-\infty}^{\infty} U dz \tag{131.6}$$

を導入した（$\boldsymbol{\rho}$ は xy 平面内の動径ベクトルである）.

高速粒子の散乱は主として小角でおこる．このことをこれから考察しよう．この場合運動量の変化 $\hbar\boldsymbol{q}$ は比較的小さく（$q \ll k$），したがってベクトル $\boldsymbol{q}$ は入射粒子の波動ベクトル $\boldsymbol{k}$ に垂直，すなわち xy 平面内にあるとみなすことができる．波の散乱は (131.5) から入射波 e^{ikz}（$z\to-\infty$ における関数 (131.4)）を差し引いて得られる．波動ベクトル $\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}$ をもつ散乱振幅は，散乱波の対応するフーリエ成分

$$f \sim \int \left[S(\boldsymbol{\rho})-1\right] \exp\left(-i\boldsymbol{q\rho}\right) d^2\rho$$

に比例する[1]（$d^2\rho = dxdy$）．この式の比例係数はボルン近似の極限の場合と比較して得ることができる（以下参照）.

この計算はまた別の方法で行なうことができて，それによって完全に確定した式に直接導かれる．このためには式 (129.2) を用い，それに (131.4) の ψ を代入する．この場合，(45.8) によれば

$$\frac{2m}{\hbar^2}UF = 2ik\frac{\partial F}{\partial z}$$

であることに注目すると，（e^{ikR_0}/R_0 の係数である）散乱振幅に対する次式が得られる：

$$\begin{aligned} f &= \frac{k}{2\pi i}\int \frac{\partial F}{\partial z} \exp\left(-i\boldsymbol{q\rho}\right) dxdydz \\ &= \frac{k}{2\pi i}\int \left[F(z=\infty) - F(z=-\infty)\right] \exp\left(-i\boldsymbol{q\rho}\right) dxdy. \end{aligned}$$

1）散乱振幅を決定するこの方法は，フラウンホーファー回折の研究に適用される方法と類似のものである（第Ⅱ巻『場の古典論』§61 参照）．回折効果のために $z \gtrsim ka^2$ のとき公式 (131.4) が適用できなくなることに注目しよう.

F に対する表式を代入すると，最終的に次式が得られる[1]：

$$f=\frac{k}{2\pi i}\int[S(\boldsymbol{\rho})-1]\exp(i\boldsymbol{q}\boldsymbol{\rho})d^2\rho. \tag{131.7}$$

もしもエネルギーが十分大きくて $\delta\sim|U|a/\hbar v\ll1$ であるならば，ボルン近似が適用できる．実際に $S-1\approx2i\delta$ と展開して，(131.7) より

$$f=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int U\exp(-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{\rho})d^2\rho dz$$

が得られる．これは (126.4) と同じである．

光学定理 (125.9) を用いると，(131.7) より全散乱断面積を得ることができる．角度ゼロの散乱振幅は，$\boldsymbol{q}=0$ における f の値である．したがって

$$\sigma=\int2\,\mathrm{Re}\,(1-S)d^2\rho=\int4\sin^2\delta(\boldsymbol{\rho})d^2\rho \tag{131.8}$$

となる．積分記号の中の表式は，衝突パラメーターが $d^2\rho$ の範囲にある粒子に対する散乱断面積とみなすことができる[2]．

式 (131.7) は中心対称場を仮定していない．中心対称場に対してこの式が厳密な一般式 (123.11) からどのようにして直接得られるかを見るのは教訓的である．

条件 (131.1)-(131.3) のもとで散乱において重要な役割を果たすのは，大きい角運動量 l をもつ部分振幅である．このため波動関数に対しては準古典性の条件が満足されて，δ_l に対して式 (124.1) を用いることが許される．それに $r_0\approx l/k$，$r^2=z^2+l^2/k^2$ を代入すると

$$\delta_l\approx-\frac{m}{\hbar^2}\int_{l/k}^{\infty}\frac{U(r)dr}{\sqrt{k^2-l^2/r^2}}=-\frac{m}{\hbar^2k}\int_0^{\infty}U(\sqrt{z^2+l^2/k^2})dz$$

---

1) 2次元の場合，場 $U(x,z)$ における散乱振幅は類似の式

$$f=\sqrt{\frac{k}{2\pi i}}\int[S(x)-1]e^{-iqx}dx \tag{131.7a}$$

によって決定される．自乗 $|f|^2d\theta$ は y 軸に沿って単位の長さあたりの散乱断面積であり，θ は xz 面内の散乱角である（§ 126 の問題 6 における定義とも比較せよ）．

2) § 152 では粒子系による散乱の場合へ式 (131.7)，(131.8) を一般化したものが与えられる．

を得る．これは $\rho=l/k$ における関数 $\delta(\rho)$ (131.6) の値と同じである[1]．さらに小角 ($\theta\ll1$) の範囲では，大きい l をもつルジャンドル多項式は (49.6) の形にあらわすことができる：

$$P_l(\cos\theta)\approx J_0(\theta l)=\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}e^{-i\theta l\cos\varphi}d\varphi.$$

この式を公式 (123.11) に代入して，その中で（l に関する）和を積分に置きかえると，次式を得る：

$$f=\frac{1}{\pi}\iint_0^{2\pi}f_l e^{-i\theta l\cos\varphi}d\varphi\cdot ldl=\frac{k^2}{\pi}\int f_l\exp(-i\boldsymbol{q\rho})d^2\rho. \qquad (131.9)$$

ここで $\boldsymbol{q}$ および $\boldsymbol{\rho}$ は絶対値 $q=k\theta$, $\rho=l/k$ をもつ2次元ベクトルである．最後にこの式で f_l を (123.15) で $\delta_l=\delta(l/k)$ とした形に置くと，式 (131.7) に戻る．

中心対称場における散乱に対して，式 (131.7) は，その中で xy 面内の極角 φ に関する積分 ($d^2\rho=\rho d\rho d\varphi$) を実行すると，次の形をもつ：

$$f=-ik\int\{\exp[2i\delta(\rho)]-1\}J_0(q\rho)\rho d\rho. \qquad (131.10)$$

§126 ですでに述べたように，もしも この場合断面積が指数関数的に小さいならば，高速粒子の大きい角の散乱に対してボルン近似は適用できない．この条件の下ではここで述べた方法もまた適用できない．実際にこの場合には準古典的な場合を扱うことになり，それに対しては摂動論が適用できない．

準古典的な近似の一般則によれば（§52, §53 参照），散乱断面積の減少の指数関数則における指数は，古典的に到達できない運動の領域において《複素軌

1) 準古典的関数 $2\hbar\delta(\boldsymbol{\rho})$ は，粒子が古典的軌道に沿って通過したときの，場 U に関する作用の変化をあらわしている．高速粒子に対してはこの軌道を直線とみなすことができて，このとき $2\delta(\boldsymbol{\rho})$ は古典的な作用積分の差

$$\int_{-\infty}^{\infty}\sqrt{k^2-\frac{2m}{\hbar^2}U}dz-\int_{-\infty}^{\infty}kdz\approx-\frac{m}{\hbar^2k}\int_{-\infty}^{\infty}Udz$$

である．この意味で関数 $2\delta(\boldsymbol{\rho})$ は幾何光学におけるアイコナールと同様の役割をここで果たしている．このことに関連して，散乱理論におけるこのような近似はしばしば**アイコナール近似**と呼ばれる．しかしながら，散乱振幅はけっしてそれの準古典的な値に帰着されることはないことを強調しておこう．なぜならば一般的に言って，条件 $\theta l\gg1$, $\delta_l\gg1$ は満たされないからである．

跡》を考察することにより決定できる[1].

古典的な散乱の問題では，場 $U(r)$ における粒子の散乱角 θ と衝突パラメーター ρ との間の関係は次式で与えられる：

$$\frac{\pi\mp\theta}{2}=\int_{r_0}^{\infty}\frac{\rho dr}{r^2\sqrt{1-\frac{\rho^2}{r^2}-\frac{U}{E}}}. \tag{131.11}$$

ここで r_0 は中心からの最小の距離であって，方程式

$$1-\frac{\rho^2}{r^2}-\frac{U}{E}=0 \tag{131.12}$$

の根である ((127.5) 参照)．われわれに興味のある場合は，古典的粒子が散乱されることのできない角度範囲に対応している[2]．したがって，これらの角度は（対応する r_0 の複素値をもつ）方程式 (131.11) の複素解 $\rho(\theta)$ に対応している．このようにして求められた $\rho(\theta)$ および粒子の古典的軌道角運動量 $mv\rho$ に基づいて，作用

$$S(\theta)=mv\int\rho(\theta)d\theta \tag{131.13}$$

を計算する（ここで v は無限遠での粒子の速度である)．そして散乱振幅は

$$f\sim\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\operatorname{Im}S(\theta)\right) \tag{131.14}$$

である．一般的にいって，方程式 (131.12) は一つよりも多くの複素根をもつ．(131.11) における r_0 としては，虚部 $\operatorname{Im}S$ の正の最小値を与えるものをとらなければならない．それればかりでなく，もしも関数 $U(r)$ が複素特異点をもつならば，それらもまた r_0 のとり得る値に入れなければならない[3].

積分 (131.11) で重要な役割を果たすのは，$r\sim r_0$ の領域である．このとき，大きいエネルギー E の場合に対して，根号の中の項 U/E は無視できる；積分を実行すると次式を得る：

---

1) この問題の指数関数則の前にある因子の議論については，ア・ゼ・パタシンスキー，ヴェ・エリ・パクロフスキー，イ・エム・ハラトニコフの論文を参照せよ (А. З. Паташинский, В. Л. Покровский, И. М. Халатников, ЖЭТФ, **45**, 989 (1963), A. Z. Patashinskii, V. L. Pokrovskii and I. M. Khalatnikov, Soviet Physics JETP, **18**, 683, 1964).

2) ここで述べた方法は，大きい E に対してのみならず，一般に指数関数的に小さい散乱のあらゆる場合においても適用できる．

3) もしも $U(r)$ が実の r に対して特異点をもつならば，断面積の減少は一般に指数関数則に従わないことを思い起こせ (§126 参照).

$$\rho=r_0\cos\frac{\theta}{2}. \tag{131.15}$$

もしも r_0 が関数 $U(r)$ の特異点であるならば，それは場の性質にのみ依存して，ρ または E に依存しない．(131.13) に基づいて S を計算すると，この場合散乱振幅は

$$f\sim\exp\left(-\frac{2mv}{\hbar}\sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{Im}\,r_0\right) \tag{131.16}$$

となることがわかる．

ところが，もしも r_0 として，方程式 (131.12) の根をとらなければならないならば，指数の形は場の具体的な性質に依存する．たとえば関数

$$U=U_0e^{-(r/a)^2}$$

に対して（これは有限の距離にはまったく特異点をもたない），方程式

$$\frac{U}{E}=1-\frac{\rho^2}{r^2}\approx\sin^2\frac{\theta}{2}$$

から

$$r_0\approx ia\sqrt{\log\left(\frac{E}{U_0}\sin^2\frac{\theta}{2}\right)} \tag{131.17}$$

を得る．θ への依存性が弱いために，r_0 は (131.13) の積分では定数とみなすことができて，散乱振幅に対しては (131.17) の r_0 をもつ式 (131.16) が得られる．

問　題

1. 条件 (131.1)：$U_0\ll\hbar^2k^2/m$ のもとで，半径 a，深さ U_0 の球状直角形ポテンシャルの井戸による全散乱断面積を求めよ．

解　次式を得る：

$$\int_{-\infty}^{\infty}Udz=-2U_0\sqrt{a^2-\rho^2}.$$

(131.7) により前方 ($q=0$) 散乱振幅は

$$f(0)=-\frac{ik}{2\pi}\int_0^a\left[\exp\left(\frac{2iU_0}{\hbar v}\sqrt{a^2-\rho^2}\right)-1\right]2\pi\rho d\rho$$
$$=-ika^2\int_0^1(e^{2i\nu x}-1)xdx=\frac{ka^2}{2}\left[i-\frac{e^{2i\nu}}{\nu}-\frac{i}{2\nu^2}(e^{2i\nu}-1)\right]$$

である．ここで $\nu=U_0a/\hbar v$ は《ボルン・パラメーター》である．光学定理 (125.9) により，全断面積はこれから

$$\sigma=2\pi a^2\left[1+\frac{1}{2\nu^2}-\frac{\sin 2\nu}{\nu}-\frac{\cos 2\nu}{2\nu^2}\right]$$

となる．

$\nu\ll 1$ である極限の（ボルンの）場合，この式は $\sigma=2\pi a^2\nu^2$ となり，§126 の問題 1 と一致する．逆の $\nu\gg 1$ の極限の場合には単に $\sigma=2\pi a^2$ となり，これは幾何学的断面積の 2 倍である．この後者の結果は単純な意味をもっている．$\nu\gg 1$ のとき $\rho<a$ なる衝突パラメーターをもつすべての粒子は散乱される，つまり入射束から外れる．この意味で井戸は《吸収する》球のように振舞う；このときバビネの原理（第II巻『場の古典論』§61 の最後）により，全断面積は《吸収》断面積の 2 倍となる．

2. 場 $U=U_0\exp(-r^2/a^2)$ について前問と同じことを行え．

解 この場合次式を得る：

$$\int_{-\infty}^{\infty}U dz=a\sqrt{\pi}\,U_0\exp(-\rho^2/a^2).$$

(131.7) に代入し，積分において明らかな変数置換を行なうと，角度ゼロの散乱振幅に対する式を得る：

$$f(0)=-\frac{ika^2}{2}\int_0^{\nu\sqrt{\pi}}(e^{-iu}-1)\frac{du}{u}.$$

ここでふたたび $\nu=U_0a/\hbar v$ である．これから全断面積は

$$\sigma=2\pi a^2\int_0^{\nu\sqrt{\pi}}(1-\cos u)\frac{du}{u}$$

となる．

$\nu\ll 1$ のとき被積分式は $u/2$ に帰着され，断面積は $\sigma=\pi a^2\nu^2/2$ となって，§126 の問題 2（$ka\gg 1$ の場合）の結果と一致する．$\nu\gg 1$ のとき被積分式を，小さいパラメーター λ を用いて $(1-e^{-\lambda u}\cos u)/u$ の形に書き，あとで λ をゼロに収束させる．部分積分を行なって次式を得る：

$$\int_0^{\nu\sqrt{\pi}}(1-\cos u)\frac{du}{u}\approx\log(\nu\sqrt{\pi})-\int_0^{\infty}\log u\sin u\,du=\log(\nu\sqrt{\pi})+C$$

（C はオイラーの定数である）．したがって次式を得る：

$$\nu\gg 1 \text{ のとき}\quad \sigma=2\pi a^2\log(\nu\sqrt{\pi}\,e^C).$$

3. 半径 a の円柱領域に集中された磁場による電子の小角散乱断面積を求めよ（A. Aharonov, D. Bohm, 1959).

解 磁場を円柱領域の軸と同じ y 軸に沿った方向に向いているとし，電子の入射方向を z 軸に選ぶことにしよう．すると散乱の全様相は y 座標によらず，以下に xz 面内の 2 次元の問題を解けばよい．

円柱領域の外では場は $\boldsymbol{H}=0$ であるが，ベクトル・ポテンシャルはゼロでなく

$$\boldsymbol{A}=\frac{\Phi}{2\pi}\nabla\varphi \tag{1}$$

である．ここで φ は xz 面内の極角，Φ は磁束である；実際にこの面内の（半径 $r>a$ の）

円の面積にわたって積分すると

$$\int H dx dz = \oint A dl = \frac{\Phi}{2\pi}\varphi\Big|_0^{2\pi} = \Phi$$

が得られる．ポテンシャル (1) は電子の（平面波の）波動関数の位相を変える；(111.9) により

$$\psi = e^{ikz}\exp\left(\frac{ie}{\hbar c}\frac{\Phi}{2\pi}\varphi\right) \tag{2}$$

を得る．しかしながらこの式は $z>0$ の半軸に沿った（幅 a の）せまい領域には適用できない．なぜならば場の領域を通過する粒子の運動は，場の摂動を受けるからである．このことにより，原点のまわりの迂回（角 φ が 2π だけ増加する）に対する関数 (2) のみかけ上の非一意性が説明される．実際に，$z>0$ の半軸の近傍に（有限の幅の）切断が存在し，これは (2) の非適用性に基づいている；切断の両側で φ は 2π だけ異なる二つの値，たとえば $\mp\pi$ をとる．

小さい運動量遷移 $q\approx k\theta$ をもつ小角 θ の散乱に対して（$qa\ll 1$, $\theta\ll 1$），重要なのは横方向の距離 $x\sim 1/q\ll a$ であって，切断幅は無視することができる．$z\gg|x|$ の空間領域を考えると，その中では z 軸の両側で ψ の x への依存性をも無視することができる；すると次式を得る[1]：

$$\psi = e^{ikz}F(x), \qquad F(x) = \begin{cases}\exp(-ie\Phi/2\hbar c), & x>0\\ \exp(ie\Phi/2\hbar c), & x<0\end{cases} \tag{3}$$

《2次元の》散乱振幅は式 (131.7a) によって計算される[2]．$q\neq 0$ のとき次式を得る：

$$f = \sqrt{\frac{k}{2\pi i}}\left\{\exp\left(-\frac{ie\Phi}{2\hbar c}\right)\int_0^\infty e^{-iqx}dx + \text{c. c.}\right\}.$$

積分はその中に因子 $e^{-\lambda x}$ を導入し，あとで $\lambda\to 0$ の極限をとることによって計算される．結果として次式を得る：

$$f = -\frac{1}{q}\sqrt{\frac{2k}{\pi i}}\sin\frac{e\Phi}{2\hbar c}.$$

これから散乱断面積は

$$d\sigma = |f|^2 d\theta = \frac{2}{\pi k}\sin^2\frac{e\Phi}{2\hbar c}\frac{d\theta}{\theta^2} \tag{4}$$

となる．$e\Phi/\hbar c\ll 1$ に対しては，これから次式を得る：

$$d\sigma = \frac{e^2\Phi^2}{2\pi k\hbar^2 c^2}\frac{d\theta}{\theta^2}.$$

これは摂動論が適用できる場合に対応する．

磁場が有限の空間領域に集中しているにもかかわらず，断面積 (4) が磁場の強さに周

1) 式 (3) は（本文中の (131.4) と同じく），回折効果の現われるような非常に大きい z に対して適用できない．

2) ($q\neq 0$ のとき) この式は（本文で説明されたように）ポテンシャルの場におけるシュレーディンガー方程式を用いないでも得ることができる．

期的に依存すること，および全断面積が（$\theta\to 0$ のために）発散することに注意しよう．両方ともに量子効果の特徴である．

§ 132. おそい粒子の散乱

散乱される粒子の速度が小さい極限の場合における，弾性散乱の性質を考察しよう．すなわちその速度は十分小さいため，粒子の波長は場 $U(r)$ の作用半径 a に比べて大きく（つまり $ka\ll 1$），その エネルギーはこの半径の内部の場の大きさに比べて小さいと仮定している．この問題を解くためには，波動ベクトル k が小さいとき，位相 δ_l の k への依存性の極限法則を解明することが必要となる．

$r\lesssim a$ のとき，厳密なシュレーディンガー方程式（123.7）の中で k^2 をもつ項のみを無視できる：

$$R_l''+\frac{2}{r}R_l'-\frac{l(l+1)}{r^2}R_l=\frac{2m}{\hbar^2}U(r)R_l. \tag{132.1}$$

ところが $a\ll r\ll 1/k$ の領域ではまた $U(r)$ をもつ項をも省略できて，残るものは

$$R_l''+\frac{2}{r}R_l'-\frac{l(l+1)}{r^2}R_l=0 \tag{132.2}$$

である．この方程式の一般解は

$$R_l=c_1r^l+\frac{c_2}{r^{l+1}} \tag{132.3}$$

である．定数 c_1 および c_2 の値は原理的に，具体的な関数 $U(r)$ をもつ方程式（132.1）を解くことによってのみ決定できる；それらはもちろん異なる l に対して異なっている．

さらに大きい距離 $r\sim 1/k$ では，シュレーディンガー方程式の中で $U(r)$ をもつ項は省略できるが，k^2 は無視できず，その結果：

$$R_l''+\frac{2}{r}R_l'+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_l=0, \tag{132.4}$$

つまり自由運動の方程式が得られる．この方程式の解は（§33 参照）：

$$R_l=c_1(-1)^l\frac{(2l+1)!!}{k^{2l+1}}r^l\left(\frac{d}{rdr}\right)^l\frac{\sin kr}{r}+c_2(-1)^l\frac{r^l}{(2l+1)!!}\left(\frac{d}{rdr}\right)^l\frac{\cos kr}{r}. \tag{132.5}$$

ここで定数係数は，$kr \ll 1$ のときこの解が (132.3) に移行するように選ばれる；それによって，$kr \ll 1$ の領域における解 (132.3) は $kr \sim 1$ の領域における解 (132.5) と《継ぎ合わせる》ことが可能になる．

最後に，$kr \gg 1$ のとき，(132.5) の解は次の漸近形をもつ (§33参照)：

$$R_l \approx \frac{c_1(2l+1)!!}{rk^{l+1}} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) + \frac{c_2 k^l}{r(2l-1)!!} \cos\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right).$$

この和は次の形であらわすことができる：

$$R_l \approx \mathrm{const} \cdot \frac{1}{r} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right). \tag{132.6}$$

ここで δ_l は次の等式からきめられる：

$$\tan \delta_l \approx \delta_l = \frac{c_2}{c_1(2l-1)!!(2l+1)!!} k^{2l+1} \tag{132.7}$$

(k は小さいので，あらゆる位相 δ_l は小さい)．

(123.15) によれば，部分散乱振幅は

$$f_l = \frac{1}{2ik}(e^{2i\delta_l} - 1) \approx \frac{\delta_l}{k}$$

であり，小さいエネルギーの極限の場合には

$$f_l \propto k^{2l} \tag{132.8}$$

という結論に到達する．

このようなわけで，$l \neq 0$ をもつあらゆる部分振幅は $l=0$ をもつ散乱振幅に比べて小さいことがわかる（つまりいわゆる **s-散乱**である）．前者を無視すると，全振幅に対して

$$f(\theta) \approx f_0 = \frac{\delta_0}{k} = \frac{c_2}{c_1} \equiv -\alpha \tag{132.9}$$

が得られ，それゆえ $d\sigma = \alpha^2 do$ となるので，全断面積は

$$\sigma = 4\pi\alpha^2 \tag{132.10}$$

である．小さい速度のとき，散乱はあらゆる方向について等方的であり，その断面積は粒子のエネルギーに依存しない[1]．定数の量 α は**散乱長**と呼ばれる；

1) 原子による電子の散乱では，$1/k$ と比較すべき（条件 $ka \ll 1$）長さ a の役割を果たすものは原子半径であり，それは複雑な原子では数ボーア半径（$\hbar^2/me^2$ の数倍）に達する．この半径が大きい値をもつために，断面積の一定性は，この場合実際，数分の1電子ボルトの程度のエネルギーまでに対してのみ成り立つ．電子のエネルギーの大きいところでは断面積のエネルギーへの強い依存性があらわれる（いわゆる**ラムザウアー効果**である）．

それは正であることもあるし，負であることもある．

上で述べた議論では，場 $U(r)$ は遠距離で $(r\gg a)$ 十分はやく減少するため，そこで行なった項の省略が妥当であることが暗黙のうちに仮定されていた．$U(r)$ の減少の要求されるはやさがどのようなものでなければならないかは容易にわかる．大きい r に対して，関数 R_l (132.3) の中の第2項は第1項に比べて小さい．それにもかかわらずその項を保持することが妥当であるためには，方程式 (132.2) 中の残された小さい項 $\sim c_2/r^{l+1}r^2$ が項 $UR_l\sim Uc_1r^l$ に比べて必ず大きくなければならない．後者は (132.1) から (132.2) へ移行するとき省略されるものである．このため，部分振幅 f_l に対する法則 (132.8) が妥当であるためには，$U(r)$ は $1/r^{2l+3}$ に比べてはやく減少しなければならない．とくに，f_0 の計算およびそれに伴ってエネルギーに依存しない等方散乱の結果 (132.9) は，遠距離で $U(r)$ が $1/r^3$ よりもはやく減少するときにのみ妥当である．

もし場 $U(r)$ が遠距離で指数関数則に従って減少するならば，振幅 f_l の k のベキによる展開の高次の項の性質について一定の結論を下すことができる．§128 で考察したように，この場合複素変数 E の関数とみなされる振幅 f_l は，E が実の負数のときに実である[1]．したがって，まったく同じことが式 (125.15)

$$f_l=\frac{1}{g_l-ik}$$

の中の関数 $g_l(E)$ に対しても成り立つ（$E<0$ のとき，ik は実である）．他方，関数 $g_l(E)$ は（その定義により）$E>0$ のとき実である．このようなわけで，関数 $g_l(E)$ はあらゆる実の E に対して実であり，それゆえ，また E の整数ベキ，つまり k の偶数ベキで展開されなければならないことがわかった．ところが振幅 $f_l(k)$ 自身については次のようにいうことができる；それは ik の整数ベキで展開されて，k の偶数ベキをもつあらゆる項は実であり，k の奇数ベキをもつ項は虚である．(132.8) によれば，$f_l(k)$ の展開は項 $\sim\delta_l/k\infty k^{2l}$ から始まり，それゆえ $g_l(k)$ の展開は k^{-2l} に比例した項から始まる．

遠距離で場がベキ乗則 $U\approx\beta r^{-n}$, $n\leqq 3$ に従って減少するとき，すでに示した

---

1) 小さい E に対して条件 (128.6) は，U が法則 $e^{-r/a}$ によって減少する場合にも満たされている．

ような振幅が一定であるという (132.9) の結果は成り立たない．

n の種々の値に対して起こる状況を考察しよう．$n \leqq 1$ のとき十分小さい速度に対して，実際上衝突パラメーター ρ のあらゆる値に対して条件

$$\rho|U(\rho)| \gg \hbar v \tag{132.11}$$

が満たされており，したがって，散乱は古典的な式によって記述される（条件 (127.9) 参照）．

$1<n<2$ のとき不等式 (132.11) は ρ のあまり大きい領域では成り立たない；このことによって，あまり小さくない角度での散乱は古典的となる．同時にまた，

$$\rho|U(\rho)| \ll \hbar v \tag{132.12}$$

であるような ρ の値の領域が存在する．つまり摂動論が適用されるための条件が満たされる（(126.2) 参照）．

$n>2$ のとき遠距離で不等式

$$|U| \ll \frac{\hbar^2}{mr^2} \tag{132.13}$$

が成立し，したがってこれらの距離における相互作用から生ずる散乱への寄与は摂動論を用いて計算できる（ところがもっと近距離では，摂動論が適用できるための条件は満足されていない）[1]．いま r_0 として，$r \gg r_0$ のとき不等式 (132.13) が成り立ち，同時に $r_0 \ll 1/k$ であるような r の値をとることにしよう．距離 $r \gg r_0$ の領域からの散乱振幅への寄与は，(126.12) により次の積分で与えられる：

$$-\frac{2m\beta}{\hbar^2}\int_{r_0}^{\infty}\frac{1}{r^n}\frac{\sin qr}{qr}r^2dr = -\frac{2m\beta}{\hbar^2}q^{n-3}\int_{qr_0}^{\infty}\frac{\sin\xi}{\xi^{n-1}}d\xi. \tag{132.14}$$

$2<n<3$ のときこの積分は下限で収束し，小さい速度 ($kr_0 \ll 1$) に対してこの下限をゼロと置くことができて，積分は $q^{-(3-n)}$，つまり速度の負のベキに比例することになる．したがってこの場合，振幅へのこの寄与が主なものであるので，

$$f \backsim q^{-(3-n)}, \qquad 2<n<3 \tag{132.15}$$

となる．これより粒子の速度および散乱角への散乱断面積の依存性が決定され

1) 小さい速度での散乱は，この場合けっして準古典的となることがない．そのわけは，不等式 (132.11) は同時に要求される条件 $|U(\rho)| \lesssim E$ と両立しないからである．

る．

$n=3$ のとき積分 (132.14) は下限で対数的に発散する．この場合でもそれはなお散乱振幅の主たる部分であるので，

$$f \propto \log \frac{\text{const}}{q}, \qquad n=3 \tag{132.16}$$

となる．

$n>3$ のとき $r \gg r_0$ の領域からの寄与は $k \to 0$ に対して減少し，散乱は定数の振幅 (132.9) により決定される．しかしながら散乱振幅への (132.14) の寄与は，相対的にその値が小さいにもかかわらず，この場合その《異常性》のため一定の重要性をもっている．$f(k)$ が k の整数ベキによって展開できるということは，$U(r)$ が十分はやく減少する場合の《正常な》状況であり，そして展開のあらゆる実の項は k の偶数ベキに比例していることがわかる．だが (132.14) に何回か部分積分を行なうと（このとき分母の中のベキ数 ξ は下がる)，k の偶数ベキを含む部分をそれから分離できて，その結果 $qr_0 \to 0$ のとき収束する積分が残り，それはベキ k^{n-3} に比例し，これは一般的にいって偶数ベキでない[1]．

問　題

1. 深さ U_0 半経 a の直角形球状ポテンシャル井戸によるおそい粒子の散乱断面積を求めよ．

解 粒子の波動ベクトルは条件 $ka \ll 1$ および $k \ll \kappa$（ここで $\kappa=\sqrt{2mU_0}/\hbar$）を満足していると仮定する．われわれに興味があるのは位相 δ_0 だけである．したがって方程式 (132.1) で $l=0$ と置くと，関数 $\chi=rR_0(r)$ に対して $r<a$ のときの方程式 $\chi''+\kappa^2\chi=0$ が得られる．$r=0$ のときゼロとなるこの方程式の解は（χ/r は $r=0$ のとき有限でなければならない)：

$$\chi=A\sin\kappa r \quad (r<a).$$

$r>a$ のとき関数 χ は方程式 $\chi''+k^2\chi=0$（方程式 (132.4) で $l=0$ と置いたもの）を満足し，これから

$$\chi=B\sin(kr+\delta_0) \quad (r>a).$$

$r=a$ における χ'/χ の連続性の条件により

1) もしも n が奇の整数 ($n=2p+1$) ならば，$n-3=2p-2$ は偶数である．それにもかかわらず，積分 (132.14) はこの場合にも《異常な》部分をもち，$q^{2p-2}\log q$ に比例する散乱振幅への寄与を与える．

$$\kappa \cot a\kappa = k \cot (ka+\delta_0) \approx \frac{k}{ka+\delta_0}.$$

これから δ_0 が決められる．この結果散乱振幅に対して次式を得る[1]：

$$f = \frac{\tan \kappa a - \kappa a}{\kappa}.$$

$\kappa a \ll 1$ (つまり $U_0 \ll \hbar^2/ma^2$) のとき，この式は $\sigma = \frac{4}{9}\pi a^2 (\kappa a)^4$ を与え，ボルン近似の結果と一致する（§126，問題1参照）．

2. 高さ U_0 の直角形球状《ポテンシャル隆起》による散乱について同様の計算を行なえ．

解　前問の解で U_0 を $-U_0$ に置きかえて（それにともなって κ を $i\kappa$ に置きかえて）解が得られる．散乱振幅は

$$f = \frac{\tanh \kappa a - \kappa a}{\kappa}$$

となる．$\kappa a \gg 1$ の極限の場合には

$$f = -a, \qquad \sigma = 4\pi a^2$$

となる．この結果は半径 a の不透過球による散乱に対応している．古典力学はこの4分の1の値 ($\sigma = \pi a^2$) を与えるであろうことを強調しておく．

3. 場 $U = \alpha/r^n$，$\alpha > 0$，$n > 3$ において小さいエネルギーをもつ粒子の散乱断面積を求めよ．

解　方程式(132.1)で $l=0$ と置いたものは

$$\chi'' - \gamma^2 \frac{\chi}{r^n} = 0, \qquad \gamma = \frac{\sqrt{2m\alpha}}{\hbar}$$

である．置換

$$\chi = \varphi\sqrt{r}, \qquad r = \left(\frac{2\gamma}{(n-2)x}\right)^{2/(n-2)}$$

を行なうと，上の式は次の形になる：

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{1}{x}\frac{d\varphi}{dx} - \left[1 + \frac{1}{(n-2)^2 x^2}\right]\varphi = 0.$$

つまりこれは虚の引数 ix をもつ $1/(n-2)$ 次のベッセル関数の方程式である．$r=0$（つまり $x=\infty$）でゼロとなる解は，定数因子を除いて次のようになる：

$$\chi = \sqrt{r}\, H^{(1)}_{1/(n-2)}\left(\frac{2i\gamma}{n-2} r^{-(n-2)/2}\right).$$

よく知られた式

$$H^{(1)}_p(z) = \frac{i}{\sin p\pi}\left[e^{-ip\pi} J_p(z) - J_{-p}(z)\right]; \qquad J_p(z) \approx \frac{z^p}{2^p \Gamma(1+p)} \quad (z \ll 1)$$

---

1) もしも κa が $\pi/2$ の奇数倍に近いような井戸の幅と深さであるならば，この式は成り立たなくなる．κa のこのような値に対して，負のエネルギー準位の離散スペクトルのうちでゼロに近い準位があり（§33，問題1参照），散乱は次節で得られる式で記述される．

を用いると，遠距離 $(\gamma \ll r \ll 1/k)$ における関数 χ に対して，$\chi = \mathrm{const}\cdot(c_1 r + c_2)$ の形の式が得られ，比 c_2/c_1 に基づいて次のような散乱振幅が求められる：

$$f = -\left(\frac{\gamma}{n-2}\right)^{2/(n-2)} \frac{\Gamma\left(\frac{n-3}{n-2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n-1}{n-2}\right)}.$$

4. 遠距離で法則 $U = \beta r^{-n}$, $2 < n \leqq 3$ に従って減少する場の中でのおそい粒子の散乱振幅を求めよ．

解 散乱振幅の中の主な項は，式（132.14）で積分の下限をゼロと置いたものによって与えられる．積分を計算すると次の結果が得られる：

$$f = \frac{\pi m\beta}{\hbar^2} \frac{q^{n-3}}{\Gamma(n-1)\cos\frac{\pi n}{2}}, \quad 2 < n < 3. \tag{1}$$

また $n=3$ のとき

$$f = -\frac{2m\beta}{\hbar^2} \log\frac{\mathrm{const}}{q}. \tag{2}$$

（1）をルジャンドル多項式によって展開すると，（（123.14）によって定義される）部分散乱振幅は次式が得られる：

$$f_l = -\frac{\sqrt{\pi}\, m\beta}{2\hbar^2} \frac{\Gamma\left(\frac{n-1}{2}\right)\Gamma\left(l - \frac{n-3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)\Gamma\left(\frac{n+1}{2}+l\right)} k^{n-3}. \tag{3}$$

$n > 3$ のとき同じ式（1）が散乱振幅の《異常》部分を与える．$2l > n-3$ であるような l の値に対して，量（3）は部分振幅のうちの主な部分をなしている；（132.8）のかわりにこの場合 $f_l \propto k^{n-3}$ が得られる．

5. 場 $U(r) = -U_0 \exp(-r/a)$, $U_0 > 0$ におけるおそい粒子の散乱振幅を求めよ．

解 変数変換

$$x = 2a\kappa e^{-r/2a}, \qquad \kappa = \sqrt{2mU_0}/\hbar$$

のあとに，関数 $\chi = rR_0$ に対する方程式（132.1）は次の形をもつ：

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} + \frac{1}{x}\frac{d\chi}{dx} + \chi = 0.$$

この方程式の一般解は

$$\chi = AJ_0(x) + BN_0(x)$$

である．ここで J_0 および N_0 はそれぞれ第1種および第2種のベッセル関数である．$r=0$ で $\chi=0$ という条件により

$$A/B = -N_0(2\kappa a)/J_0(2\kappa a)$$

を得る．$a \ll r \ll 1/k$ の領域は $x \ll 1$ に対応している（この場合もちろん $a\kappa \exp(-1/a\kappa) \ll 1$ が仮定されている）．ここで

$$\chi \approx A+B\frac{2}{\pi}\log\frac{\gamma x}{2}=A+\frac{2B}{\pi}\log\kappa a\gamma-\frac{B}{\pi a}r$$

である．ここで $\gamma=e^C=1.78\cdots$ (C はオイラーの定数)．この式は式(132.3)に対応し，このようにして得られた値 c_1 および c_2 を用いて，散乱振幅は次のようになる：

$$f=-a\left(\frac{\pi A}{B}+2\log\kappa a\gamma\right)=\frac{a\pi}{J_0(2\kappa a)}\left[N_0(2\kappa a)-\frac{2}{\pi}\log(\kappa a\gamma)J_0(2\kappa a)\right].$$

$\kappa a\ll 1$ の極限の場合，$f=2a^3\kappa^2$ となる（これはボルン近似の式(126.14)と一致する）．$\kappa a\gg 1$ の場合には，$f=-2a\log(\kappa a\gamma)$ となる．

6.　摂動論の2次近似において，小さいエネルギーの極限の場合における散乱振幅を求めよ（イ・ヤ・ポメランチュク И. Я. Померанчук, 1948）．

解　$k\to 0$ のとき式(130.13)の第2項における積分は次の形をもつ：

$$-\int\frac{U_{-\mathbf{k}'}U_{\mathbf{k}'}}{k''^2}d^3k''=-\iiint U(\mathbf{r})U(\mathbf{r}')e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\frac{d^3k''}{k''^2}dVdV'$$

$$=-2\pi^2\iint\frac{U(\mathbf{r})U(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}dVdV'.$$

ここで公式

$$\int e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\frac{4\pi}{k^2}\frac{d^3k}{(2\pi)^3}=\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

（第II巻『場の古典論』§51参照）を用いた．したがって散乱振幅は

$$f=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int UdV+\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\iint\frac{U(\mathbf{r})U(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}dVdV' \qquad (1)$$

である．中心力場の場合にこの式は

$$f=-\frac{2m}{\hbar^2}\int Ur^2dr+\frac{8m^2}{\hbar^4}\iint_{r'>r}U(r)U(r')r^2dr\cdot r'dr'$$

となる．

式(1)の中の第2項はいつも正である（このことは $\mathbf{k}$-空間における最初の積分表式から明らかである）．このことから，斥力場 ($U>0$) の場合には，1次ボルン近似は小さいエネルギーの散乱断面積に対して大きすぎる値を，また引力場 ($U<0$) の場合には小さすぎる値を与える．

§ 133. 小さいエネルギーにおける共鳴散乱

つぎに述べるような引力場におけるおそい ($ka\ll 1$) 粒子の散乱は特別の考察を必要とする．すなわち，負のエネルギー準位の離散スペクトルの中に s-状態があり，そのエネルギーは場 U の作用半径の領域の中の U の値に比べて小さいような場合の引力場である．この準位を ε ($\varepsilon<0$) であらわすことにしよう．散乱される粒子のエネルギー E は小さい量であるので，準位 ε に近く，いわば ε

にほとんど**共鳴**している位置にある．この結果，後でわかるように散乱断面積がかなり増大する．

浅い準位の存在は，散乱理論において次のような議論に基づく形式的な方法により考慮できる．

($l=0$ のとき) 関数 $\chi=rR_0(r)$ に対する厳密なシュレーディンガー方程式

$$\chi''+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(r)]\chi=0$$

において，場の《内部の》領域 ($r\leq a$) では U に比べて E を無視できる：

$$\chi''-\frac{2m}{\hbar^2}U(r)\chi=0, \qquad r\sim a. \tag{133.1}$$

ところが《外部の》領域 ($r\gg a$) では，反対に U を無視できる：

$$\chi''+\frac{2m}{\hbar^2}E\chi=0, \qquad r\gg a. \tag{133.2}$$

方程式 (133.2) の解は境界条件 $\chi(0)=0$ を満足する方程式 (133.1) の解と，($1/k\gg r_1\gg a$ であるような) ある r_1 で《継ぎ合わ》されなければならない．継ぎ合わせの条件は比 χ'/χ が連続となるようなものであって，波動関数の一般的な規格化因子に依存しないということになる．

しかしながら $r\sim a$ の領域における運動を考察するかわりに，外の領域における解に，r が小さいときの χ'/χ に対する適当な境界条件を課すことにしよう；外の解は $r\to 0$ のときゆっくり変化するので，点 $r=0$ にこの条件を形式的にあてはめることができる．$r\sim a$ の領域における方程式 (133.1) は E を含まない；したがって，それにかわる境界条件もまた粒子のエネルギーに依存してはならない．いいかえると，それは次の形をもたなければならない：

$$\left.\frac{\chi'}{\chi}\right|_{r\to 0}=-\kappa. \tag{133.3}$$

ここで κ はある定数である．しかし κ は E に依存しないので，同じ条件 (133.3) は小さい負のエネルギー $E=-|\varepsilon|$ に対するシュレーディンガー方程式の解に対しても成り立たなければならない．つまり粒子の定常状態に対応する波動関数に対しても成り立たなければならない．$E=-|\varepsilon|$ のとき，(133.2) より

$$\chi=A_0\exp\left(-\frac{\sqrt{2m|\varepsilon|}}{\hbar}r\right) \tag{133.4}$$

(A_0 は定数) が得られ，この関数を (133.3) に代入すると，κ は

$$\kappa=\frac{\sqrt{2m|\varepsilon|}}{\hbar} \tag{133.5}$$

で与えられる正の量であることがわかる.

さて境界条件 (133.3) を自由運動の波動関数

$$\chi=\text{const}\cdot\sin(kr+\delta_0)$$

に適用しよう. これは $E>0$ における方程式 (133.2) の厳密な一般解をあらわしている. その結果, 求めている位相 δ_0 は

$$\cot\delta_0=-\frac{\kappa}{k}=-\sqrt{\frac{|\varepsilon|}{E}} \tag{133.6}$$

となる. エネルギー E はここでは条件 $ka\ll 1$ によってのみ制限されているが, しかし ε に比べて小さくてはならないので位相 δ_0 は小さい量ではあり得ない.

ところが $l>0$ をもつ位相 δ_l およびそれとともに対応する部分振幅は, 前と同様小さい. したがって, 全振幅は前と同様 s-散乱の振幅と同じとみなすことができる：

$$f\approx\frac{1}{2ik}(e^{2i\delta_0}-1)=\frac{1}{k(\cot\delta_0-i)}$$

これに (133.6) を代入すると, 式

$$f=-\frac{1}{\kappa+ik} \tag{133.7}$$

および全散乱断面積に対する式

$$\sigma=\frac{4\pi}{\kappa^2+k^2}=\frac{2\pi\hbar^2}{m}\frac{1}{E+|\varepsilon|} \tag{133.8}$$

が得られる. このようなわけで, 散乱は前と同様等方的であるが, その断面積はエネルギーに依存し, 共鳴領域 ($E\sim|\varepsilon|$) において場の作用半径の自乗 a^2 に比べて大きいことがわかる (なぜなら $1/k\gg a$). 式 (133.8) の形は, 粒子間の小さい距離における粒子の相互作用の詳細には依存せず, まったく共鳴準位の値によって決定されることを強調しよう[1].

上に得られた式は, その導出にあたって行なった仮定よりももっと一般的な性質をもっている. 関数 $U(r)$ をすこし変化させよう；このとき境界条件 (133.3) の中の定数 κ の値も変化する. $U(r)$ のてきとうな変化によって κ をゼ

1) 式 (133.8) はウィグナーによって初めて導かれた (E. Wigner, 1933). ここに記述した導出の考えはベーテおよびパイエルスによるものである (H. A. Bethe, R. Peierls, 1935).

ロにすることができ，つづいて負の小さい値にすることができる．このとき散乱振幅に対しては (133.7) と同じ式が得られ，断面積に対しては (133.8) と同じ式が得られる．しかしながら後者において，量 $|\varepsilon|=\hbar^2\kappa^2/2m$ は場 $U(r)$ に対して特徴的な単なる定数であって，この場の中のエネルギー準位では決してない．このような場合に，場の中に**仮想準位**があるといい，このことは，実際にはゼロに近いいかなる準位も存在しないにもかかわらず，場に小さい変化を与えさえすればそのような準位があらわれるのに十分であることを意味している．

E の複素平面で (133.7) の解析接続を行なうと，ik は左半分の実軸上で $-\sqrt{-2mE}/\hbar$ に移行し（§128 参照），また散乱振幅は，§128 の一般的な結果と同じく，$E=-|\varepsilon|$ において極をもつことがわかる．反対に，仮想準位に対しては，当然期待されるように，物理的分岐面の上で散乱振幅のいかなる特異点も対応しない（これに対して，散乱振幅の極 $E=-|\varepsilon|$ は非物理的分岐面の上にある；§128 の 633 頁の脚注参照）.

形式的な観点からすると，式 (133.7) は式 (125.15)

$$f_0=\frac{1}{g_0(k)-ik}$$

において関数 $g_0(k)$ の展開の最初の項が負でかつ異常に小さい場合に対応している．この式をより精確にするためには，展開の第 2 項までを考慮することができて，次のように書ける：

$$f_0=\frac{1}{-\kappa_0+\frac{1}{2}r_0k^2-ik} \qquad (133.9)$$

(ランダウ Л. Д. Ландау，スマロジンスキー Я. А. Смородинский，1944)；場が十分はやく減少するとき，関数 $g_l(k)$ は k の偶数ベキで展開されることを思い起こせ（§132 参照）．われわれはここで，エネルギー準位 ε に関する量 (133.5) に対して記号 κ を保持することを考慮して，量 $g_0(0)$ を $-\kappa_0$ であらわした．上に述べた議論により，κ は $-ik=\kappa$ の値として与えられ，これは (133.9) の分母をゼロにする．つまりそれは，方程式

$$\kappa=\kappa_0+\frac{1}{2}r_0\kappa^2 \qquad (133.10)$$

の根として与えられる．(133.9) の分母の中の補正項 $r_0k^2/2$ は，仮定により k が小さいため，κ_0 に比べて小さいが，しかしそれ自身は《正常な》程度の大きさをもっている；係数 $r_0\sim a$（そしてこの係数はいつも正）である（問題１参照）．この項を考慮することは角運動量 $l\neq 0$ からの寄与を無視した散乱振幅に対する式の修正として妥当であることを強調しておく；それは f のうちで相対的に ak の程度の補正を与えるが，他方 $l=1$ をもつ散乱からの寄与は相対的に $(ak)^3$ の程度のものである．

$k\to 0$ のとき，振幅 $f_0\to -1/\kappa_0$ となる．つまり $1/\kappa_0$ は前節で導入した散乱長 α に等しい．式

$$g_0(k)\equiv k\cot\delta_0=-\frac{1}{\alpha}+\frac{1}{2}r_0k^2 \qquad (133.11)$$

の中の係数 r_0 は**相互作用の有効距離**と呼ばれる[1)]．

散乱断面積は (133.9) により

$$\sigma=\frac{4\pi}{\left(\kappa_0-\frac{1}{2}r_0k^2\right)^2+k^2}$$

となる．もしも分母の中で $\sim k^4$ の項を無視すると（これはもちろん妥当なものであるが），この式は（(133.10) を考慮して）次の形にあらわすことができる：

$$\sigma=\frac{4\pi(1+r_0\kappa)}{k^2+\kappa^2}=\frac{4\pi\hbar^2}{m}\frac{1+r_0\kappa}{E+|\varepsilon|}. \qquad (133.12)$$

《内部》領域の束縛状態の波動関数 (133.4) の表式に戻り，その中の規格化係数を上で導入したパラメーターと関係づけよう．関数 (133.9) の極 $E=\varepsilon$ における留数を求め，式 (128.11) と比較すると次式を得る：

$$\frac{1}{A_0^2}=\frac{1}{2\kappa}-\frac{r_0}{2}. \qquad (133.13)$$

---

1) 二つの核子の相互作用の重要な場合に対して，定数 α および r_0 の値を示そう．中性子と陽子が平行スピンをもつとき（$T=0$ をもつアイソ状態），$\alpha=5.4\times10^{-13}$cm，$r_0=1.7\times10^{-13}$cm である；これらの値は，重陽子の基底状態のエネルギー $|\varepsilon|=2.23$ MeV をもつ真の準位に対応している．ところが，中性子と陽子が反平行スピンをもつとき（$T=1$ をもつアイソ状態）は，$\alpha=-24\times10^{-13}$ cm，$r_0=2.7\times10^{-13}$ cm である；これらの値は $|\varepsilon|=0.067$ MeV の仮想準位に対応している．アイソ不変性の原理のため，後者の値は反平行スピンをもつ二つの中性子の系に対しても適用されなければならない（s-状態における nn 系の平行スピンはパウリの原理のため一般に禁止される）．

$\kappa r_0 \sim \kappa a \ll 1$ であるので，第2項は第1項に対する小さい補正である．この補正を無視すると，$A_0^2=2\kappa$ となり，つまり

$$\chi=\sqrt{2\kappa}e^{-\kappa r}, \qquad \psi=\frac{\chi}{\sqrt{4\pi}r}=\sqrt{\frac{\kappa}{2\pi}}\frac{e^{-\kappa r}}{r} \tag{133.14}$$

が得られる．これは式（133.14）がもしも全空間で成りたつとしたときの規格化に対応している．

つぎに，ゼロでない軌道角運動量をもつ散乱における共鳴について簡単に述べよう．

関数 $g_l(k)$ の展開は $\sim k^{-2l}$ の項からはじまる；展開の最初の二つの項を残して，部分散乱振幅は次の形に書ける：

$$f_l=\frac{1}{bE^{-l}(-\varepsilon+E)+ik}. \tag{133.15}$$

ここで b および ε は二つの定数であり，$b>0$ である（下の脚注参照）．共鳴の場合に対しては，E^{-l} の係数の異常に小さい値，すなわち異常に小さい ε が対応している．しかしながら E が小さいため，$b\varepsilon E^{-l}$ の項はそれでもなお k に比べて大きい．

もしも $\varepsilon<0$ ならば，式（133.15）の分母は実根 $E\approx-|\varepsilon|$ をもち，したがって ε は（角運動量 l をもつ）エネルギーの離散準位である[1]．しかしながら s-散乱における共鳴とは対照的に，振幅（133.15）はこの場合 a に比べてけっして大きくなることはない；角運動量 $l+1$ をもつ共鳴散乱の振幅は，角運動量 l をもつ非共鳴散乱の振幅と同程度の値にすぎないことがわかる．

ところが，もしも $\varepsilon>0$ ならば，振幅（133.15）は $E\sim\varepsilon$ の領域で $1/k$ の値の程度に達する；すなわち a に比べて大きくなる．この領域の相対的な幅は小さい：$\Delta E/\varepsilon\sim(ak)^{2l-1}$．このようなわけで，この場合には鋭い共鳴が起こる．共鳴散乱のこのような状況は，$l\neq 0$ をもつ正の準位の真の離散準位ではないにもかかわらず，準離散準位をあらわしていることによるものである；遠心ポテンシャル障壁が存在するために，小さいエネルギーをもつ粒子がこの状態から無限遠へ逃げる確率は小さく，したがってこの状態の《寿命》は大きい（§ 134 参

1）$\varepsilon<0$ で E が ε に近いとき

$$f_l\approx(-1)^{l+1}|\varepsilon|^l/b(E+|\varepsilon|)$$

となる．これを（128.17）と比較すると，$b>0$ であることがわかる．

照). これがすなわち, $l\neq 0$ をもつ共鳴散乱の性質が, 遠心障壁が存在しないときの s 状態の共鳴と異なる原因である.

(133.15) の分母は $\varepsilon>0$ のとき, $E=E_0-i(\Gamma/2)$ でゼロとなる. ここで

$$E_0\approx\varepsilon,\qquad \Gamma=\frac{2\sqrt{2m}}{b\hbar}\varepsilon^{l+1/2} \tag{133.16}$$

である. しかしながら, 散乱振幅のこの極は《非物理的》分岐面の上にある. 小さい量 Γ は準離散準位の幅である (§134 参照).

最後に, 上で述べた結果に基づいて容易に導かれる位相 δ_l の興味ある性質について述べよう.

位相 $\delta_l(E)$ をエネルギーの連続関数とみなし, それらを0と π との間の範囲に限定しないことにする (第1巻129頁の脚注2) 参照). すると等式

$$\delta_l(0)-\delta_l(\infty)=n\pi \tag{133.17}$$

が成り立つことを示そう. ここで n は引力場 $U(r)$ の中の角運動量 l をもつ離散準位の数である (N. Levinson, 1949).

これを証明するために, 条件 $|U|\ll\hbar^2/ma^2$ を満足する場において, ボルン近似があらゆるエネルギーに対して妥当であり, したがってあらゆる E に対して $\delta_l(E)\ll 1$ であることに注目しよう. このとき $\delta_l(\infty)=0$ である. なぜなら, $E\to\infty$ のとき散乱振幅はゼロに収束するからである. ところが $\delta_l(0)=0$ であるが, これは §132 の一般的な結果と一致している. 同時にまたこのような場においては離散準位が存在しないので (§45 参照), $n=0$ となる. ここでポテンシャルの井戸 $U(r)$ を徐々に《深くする》ときの, 差 $\delta_l(\Delta)-\delta_l(\infty)$ (ここで Δ はある与えられた小さい量) の変化を調べよう. 井戸が深くなるにつれて, 井戸の上端に逐次1番目, 2番目等々の準位があらわれる. このとき位相 $\delta_l(\Delta)$ は毎回 π だけ増大する[1]. 与えられた $U(r)$ に達した後, $\Delta\to 0$ とすれば, 式 (133.17) が得られる.

---

1) 式 (133.6) において, このことは δ_0 を0から π まで変えることに対応する; このとき k の与えられた小さい値に対して, 量 κ が負の値 $-\kappa\gg k$ から正の値 $\kappa\gg k$ まで変わる. $l\neq 0$ の場合, 同じことが式 $k\cot\delta_l=-bE^{-l}(E-\varepsilon)$ からいえる; つまりこのとき与えられた $E=\Delta$ に対して, ε は $\varepsilon\gg\Delta$ から $-\varepsilon\gg\Delta$ まで変わる.

問　題

1. 《内部》領域 $r\sim a$ の中の束縛状態 ($E=\varepsilon$) の波動関数を用いて相互作用の有効半径 r_0 をあらわせ（スマロジンスキー Я. А. Смородинский, 1948).

解 χ_0 を領域 $r\sim a$ における波動関数とし，それは $r\to\infty$ のとき $\chi_0\to 1$ となる条件によって規格化されているとする．すると波動関数の自乗は空間のいたるところで

$$\chi^2=A_0^2(e^{-2\kappa r}+\chi_0^2-1)$$

の形に書くことができる（この式は $\kappa r\gg 1$ のとき $A_0^2e^{-2\kappa r}$ となり，$\kappa r\ll 1$ のとき $A_0^2\chi_0^2$ となる)．これは次の条件によって規格化されなければならない：

$$\int_0^\infty\chi^2dr=A_0^2\left[\frac{1}{2\kappa}-\int_0^\infty(1-\chi_0^2)dr\right]=1.$$

これを (133.13) と比較すると，

$$r_0=2\int_0^\infty(1-\chi_0^2)dr$$

を得る．

$U(r)>0$ をもつ方程式 (131.1) の解は関数 χ_0 であるので，それにより $\chi_0(r)<\chi_0(\infty)=1$ となる．したがっていつも $r_0>0$ である．

2. 場 $U(r)$ の変分に対する位相 δ_l の変分を求めよ．

解 シュレーディンガー方程式

$$\chi_l''+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}-U\right]\chi_l=0$$

の中の $U(r)$ の変分をとると，次式を得る：

$$\delta\chi_l''+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}-U\right]\delta\chi_l=\frac{2m}{\hbar^2}\chi_l\delta U.$$

最初の方程式に $\delta\chi_l$ を掛け，第2の方程式に χ_l を掛けて，辺々相引いて，r に関して積分を行なえば，

$$(\chi_l\delta\chi_l'-\chi_l'\delta\chi_l)\Big|_{r\to\infty}=\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty\chi_l^2\delta U dr$$

となる．この等式の左辺に漸近式

$$\chi_l=\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right),$$

$$\delta\chi_l=\delta(\delta_l)\cos\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)$$

を代入すれば（この式で係数1を選ぶことによって，われわれがここで用いた χ_l の規格化が与えられている)，次式を得る：

$$\delta(\delta_l)=-\frac{2m}{k\hbar^2}\int_0^\infty\chi_l^2\delta U dr.$$

この式に基づいて，エネルギーの連続関数とみなされる位相 δ_l の符号に関して一定の結論を引き出すことができる．これらの関数の定義において非一意性（π の整数倍の付

加定数）を避けるために，それらを条件 $\delta_l(\infty)=0$ によって規格化しよう．

$U=0$ から始めると，そこではすべての $\delta_l=0$ であるが，徐々に $|U|$ を増大させると，斥力場 $(U>0)$ ではすべての $\delta_l<0$ であり，引力場 $(U<0)$ では $\delta_l>0$ であることがわかる．斥力場では $\delta_l(0)=0$ であり，したがって小さいエネルギーに対して δ_l は小さい；それゆえ散乱振幅は負である：$f\approx\delta_0/k<0$．引力場では，準位が存在しない場合においてのみ正の f に関する同様の結論を下すことができる；準位が存在する場合には小さい E に対して，位相 δ_l はゼロに近いのでなく，$n\pi$ に近く（(133.17) 参照），したがって f の符号に関してはいかなる結論も引き出すことができない．

3. ゼロに近い離散的エネルギー準位をただ一つもつ，半径 r_0 および深さ U_0 の球状直角形ポテンシャル井戸に対する散乱長 α および有効相互作用半径 r_0 を求めよ．

解 §132 の問題1と同じように行なうが，異なる点は井戸の内部領域で U_0 と比べて粒子のエネルギー $E=\hbar^2k^2/2m$ を無視しない点である．位相 δ_0 を決定するために，次の方程式が得られる：

$$k\cot(\delta_0+ak)=K\cot aK,\qquad K=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0+E)}$$

井戸の中でゼロに近いただ一つの準位があるためには

$$U_0=\frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}(1+\varDelta)$$

でなければならない．ここで $\varDelta\ll1$ である（§33 の問題1参照）．上の式を ka および $\varDelta$ のベキで展開すると

$$k\cot\delta_0\approx-\frac{\pi^2}{8a}\varDelta+\frac{ak^2}{2}$$

を得る．これから $\alpha=1/\kappa_0=8a/\pi^2\varDelta$，$r_0=a$ となる．κ_0 の値は当然のことながら $\sqrt{2m|E_1|}/\hbar$ と同じである．ここで E_1 は井戸の中のエネルギー準位である（§33 問題1参照）．

4. 半径 a の球の内部でのみゼロと異なる場 $U(r)$ に対して，s-状態の波動関数の自乗の積分 $\int_0^a\chi^2dr$ を位相 δ_0 によってあらわせ（G. Lüders, 1955）．

解 (128.10) によれば

$$\int_0^a\chi^2dr=\frac{1}{2k}\left[\chi'\frac{\partial\chi}{\partial k}-\chi\left(\frac{\partial\chi}{\partial k}\right)'\right]_{r=a}$$

を得る．ここでダッシュ記号は r に関する微分をあらわす（(128.10) における E に関する導関数は $k=\sqrt{2mE}/\hbar$ に関する導関数に置きかえられる）．$r=a$ で場はすでにゼロであるので，この式の右辺で自由運動の波動関数 $\chi=2\sin(kr+\delta_0)$ を用いることができる（これは (33.20) のように規格化されている）．その結果

$$\int_0^a\chi^2dr=2\left(a+\frac{d\delta_0}{dk}\right)-\frac{1}{k}\sin2(ka+\delta_0)>0$$

を得る．χ^2 の積分はあらかじめ正であるから，等式の右辺の表式も正でなければならな

い[1].

§ 134. 準離散準位における共鳴

崩壊可能な系は，厳密にいうと離散エネルギー・スペクトルをもたない．崩壊によって系から飛び出した粒子は無限遠へ飛び去る；この意味で系の運動は無限であり，したがってエネルギー・スペクトルは連続的である．

しかしながら，系の崩壊確率がひじょうに小さい場合が起こり得る．このような種類のもっとも簡単な例は，十分高くて幅広いポテンシャル障壁によって囲まれた粒子である．状態の準安定性の別の原因としては，崩壊において，弱いスピン－軌道相互作用のために系のスピンが変化しなければならない場合があり得る．

小さい崩壊確率をもつこのような系に対して，**準定常**状態という概念を導入することができる；つまりその状態において粒子は《系の内部》を長時間にわたって運動し，かなり長い時間 τ が経過するまでは系を変化させない；この時間 τ をこのほとんど定常的な状態の**寿命**と名づけることができる（$\tau\sim 1/w$，ここで w は単位時間あたりの崩壊確率である）．このような状態のエネルギー・スペクトルは**準離散的**である；それはいくつかのぼけた準位から成り立っており，その**幅** Γ は寿命と $\Gamma\sim\hbar/\tau$ の関係によって結ばれている（(44.7) 参照）．準離散準位の幅は準位の間の距離に比べて小さい．

準定常状態を考察するために，次のような形式的方法を適用できる．これまでわれわれはいつも，無限遠で波動関数が有限となることを要求する境界条件をもつシュレーディンガー方程式の解を考察してきた．これのかわりに今度は無限遠で発散する球面波をあらわす解を求めよう；これは最終的には，系が崩壊するとき系から飛び出す粒子に対応している．このような境界条件は複素数であることを考慮すると，エネルギーの固有値が実でなければならないということができない．反対に，シュレーディンガー方程式を解いた結果，複素固有値の組が得られるが，それを次の形に書こう：

$$E=E_0-\frac{i\Gamma}{2}. \tag{134.1}$$

1) この不等式は別の方法によりウィグナーによって前に得られていた (1955).

ここで E_0 および Γ は二つの正の量である（脚注参照）.

エネルギーの複素値の物理的意味が何であるかは容易にわかる．準定常状態の波動関数の時間因子は次の形をもつ：

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_0t-\frac{\Gamma}{2\hbar}t\right).$$

したがって，波動関数の絶対値の自乗によって与えられるあらゆる確率は，時間とともに法則 $\exp(-\Gamma t/\hbar)$ に従って減衰する[1]．とくに，《系の内部》に粒子を見いだす確率もこの法則に従って減衰する.

このようなわけで，Γ は状態の寿命を決定する；単位時間あたりの崩壊確率は

$$w=\frac{\Gamma}{\hbar} \qquad (134.2)$$

である.

遠距離における準定常状態の波動関数（発散波）は因子

$$\exp\left[\frac{ir}{\hbar}\sqrt{2m\left(E_0-\frac{1}{2}i\Gamma\right)}\right]$$

を含み，$r\to\infty$ のとき指数関数的に増大する（根の虚部は負である）．したがって，これらの関数に対する規格化積分 $\int|\psi|^2dV$ は発散する．ついでながら，このような事情のために，時間とともに $|\psi|^2$ が減衰することと，波動方程式から導かれるように規格化積分が定数でなければならないこととの間の，見かけ上の矛盾が解決されることに注意すべきである.

系の準離散準位の一つに近いエネルギーをもつ粒子の運動を記述する波動関数の形を明らかにしよう.

---

1) このことから Γ が正でなければならない必然性がわかることに注意せよ．このことが成り立っていることは，波動関数の解に無限遠で課される境界条件，あるいはそれと同等であるが（§130参照）摂動論の公式における迂回の規則によって自動的に保証されている．離散準位 n から連続スペクトルの状態 ν への遷移が一定の摂動 V によってひき起こされるものとしよう．するとエネルギー準位に対する2次の補正は

$$E_n^{(2)}=\int\frac{|V_{n\nu}|^2d\nu}{E_n^{(0)}-E_\nu+i0}$$

となる（(33.10) と比較せよ）．規則（43.10）によって次式を得る：

$$\Gamma=-2\,\mathrm{Im}\,E_n^{(2)}=2\pi\int|V_{n\nu}|^2\delta(E_n^{(0)}-E_\nu)d\nu.$$

これは遷移確率に対する表式（43.1）と一致している.

§128 におけると同様，波動関数の動径部分の（遠距離における）漸近形を (128.1) の形に書こう：

$$R_l=\frac{1}{r}\left[A_l(E)\exp\left(-\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}r\right)+B_l(E)\exp\left(\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}r\right)\right]. \quad (134.3)$$

そして E を複素変数とみなそう．実で正の E に対して：

$$R_l=\frac{1}{r}[A_l(E)e^{ikr}+B_l(E)e^{-ikr}], \qquad k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (134.4)$$

そして $A_l(E)=B_l^*(E)$ である ((128.3), (128.4) 参照)；関数 $B_l(E)$ はここでは右半分の実軸に沿ってつくられた切れ目の上端の値をとるものとする．

エネルギーの複素固有値を決定する条件は，収束波が漸近式 (134.3) の中に存在しないということにある．この意味は，$E=E_0-i\Gamma/2$ のとき係数 $B_l(E)$ がゼロにならなければならないということである：

$$B_l\left(E_0-\frac{1}{2}i\Gamma\right)=0. \quad (134.5)$$

このようなわけで，エネルギーの準離散準位は真の離散準位と同様，関数 $B_l(E)$ のゼロである．しかしながら，真の準位に対応するゼロと異なって，それらは物理的分岐面の上に存在しない．実際に，条件 (134.5) を書くに当たって，求めている準定常状態の波動関数は，$E>0$ のとき ((134.4) の中の) 発散波をあらわす項 ($\sim e^{ikr}$) と同じ (134.3) の中の項から生ずるものと仮定した．しかし点 $E=E_0-i\Gamma/2$ は右半分の実軸の下に存在する．((134.4) の中の係数が定義されている) 切れ目の上からこの点へ到達するには，この場合物理的分岐点から離れないで，点 $E=0$ の回りを迂回することによってのみできる．すると $\sqrt{-E}$ は符号を変え，その結果発散波は収束波に変わる．したがって，波の発散する性質を保存するためには，切れ目を通って下へ直接移行しなければならず，それゆえわれわれは別の非物理的分岐面へ到達する．

つぎに，準離散準位に近い実の正のエネルギー値を考察しよう（この場合もちろん，Γ は小さいことを仮定している．さもないとこのような近い値は一般に存在することができないからである）．関数 $B_l(E)$ を差 $E-(E_0-i\Gamma/2)$ のベキで展開し，1次の項のみをとると，

$$B_l(E)=\left(E-E_0+\frac{i}{2}\Gamma\right)b_l \quad (134.6)$$

と書ける．ここで b_l は定数である．これを (134.4) に代入すると，準定常状態に近い状態の波動関数に対する次のような式が得られる：

$$R_l=\frac{1}{r}\left[\left(E-E_0-\frac{i}{2}\Gamma\right)b_l^* e^{ikr}+\left(E-E_0+\frac{i}{2}\Gamma\right)b_l e^{-ikr}\right]. \quad (134.7)$$

この関数の位相 δ_l は次式で与えられる：

$$\exp(2i\delta_l)=\frac{E-E_0-i\Gamma/2}{E-E_0+i\Gamma/2}\exp(2i\delta_l^{(0)})$$

$$=\left[1-\frac{i\Gamma}{E-E_0+i\Gamma/2}\right]\exp(2i\delta_l^{(0)}). \quad (134.8)$$

ここで

$$\exp(2i\delta_l^{(0)})=(-1)^{l+1}\frac{b_l^*}{b_l} \quad (134.9)$$

である．$|E-E_0|\gg\Gamma$ のとき，位相 δ_l は $\delta_l^{(0)}$ と一致する．したがって，$\delta_l^{(0)}$ は共鳴から遠い位相の値である．

共鳴領域では δ_l はエネルギーに強く依存する．(134.8) を公式

$$\exp(2i\tan^{-1}\lambda)=\frac{\exp(i\tan^{-1}\lambda)}{\exp(-i\tan^{-1}\lambda)}=\frac{1+i\lambda}{1-i\lambda}$$

を用いて

$$\delta_l=\delta_l^{(0)}-\tan^{-1}\frac{\Gamma}{2(E-E_0)} \quad (134.10)$$

の形に書きかえると，($E\ll E_0$ より $E\gg E_0$ まで) すべての共鳴領域を通過することにより，位相は π だけ変わることがただちにわかる．

$E=E_0-i\Gamma/2$ のとき関数 (134.7) は

$$R_l=-\frac{i\Gamma}{r}b_l^* e^{ikr}$$

に帰着される．もしも，《系の内部》の領域にわたる $|\psi|^2$ の積分が 1 になるという条件で波動関数を規格化するならば，この発散波の全粒子の流れ $v|i\Gamma b_l^*|^2$ は崩壊確率 (134.2) に一致しなければならない．これから

$$|b_l|^2=\frac{1}{\hbar v\Gamma} \quad (134.11)$$

を得る．

得られた結果により，散乱させる系と散乱される粒子からなる複合系のある準離散準位 E_0 に近いエネルギー E をもつ粒子の弾性散乱の振幅を決定できる．

一般式 (123.11) において，準位 E_0 に対応する l の値をもつ項の中に式 (134.8) を代入しなければならない．すると次式を得る：

$$f(\theta)=f^{(0)}(\theta)-\frac{2l+1}{k}\frac{\Gamma/2}{E-E_0+i\Gamma/2}\exp(2i\delta_l^{(0)})P_l(\cos\theta). \quad (134.12)$$

ここで $f^{(0)}(\theta)$ は，共鳴から遠い散乱振幅であって，準定常状態の性質に依存しない (それは式 (123.11) の和のすべての項の中で $\delta_l=\delta_l^{(0)}$ と置いたものによって定義される)[1]．振幅 $f^{(0)}(\theta)$ はしばしば**ポテンシャル散乱**の振幅と呼ばれ，式 (134.12) の中の第2項は**共鳴散乱**の振幅と呼ばれる．後者は $E=E_0-i\Gamma/2$ に極をもち，上で示したようにそれは物理的分岐面の上にない[2]．

式 (134.12) は複合系の準離散準位の一つによる共鳴領域に近い弾性散乱を決定する．それの適用範囲は，差 $|E-E_0|$ が隣りの準離散準位までの距離 D に比べて小さいという条件によって与えられる：

$$|E-E_0|\ll D. \quad (134.13)$$

この式は，おそい粒子の散乱を問題にする場合にはいくらか簡単になる．すなわち共鳴領域における粒子の波長が，散乱する系の大きさに比べて大きい場合である．この場合は s-散乱のみが重要となる；準位 E_0 は実際に $l=0$ をもつ運動に属していると考えられる．するとポテンシャル散乱の振幅は実の定数 $-\alpha$ に帰着される (§132参照)[3]．ところが共鳴散乱の振幅においては，$\delta_0^{(0)}=-\alpha k\ll 1$ なので，$l=0$ と考えられ，$\exp(2i\delta_l^{(0)})$ は1に置きかえられる．このようなわけで次式を得る：

$$f(\theta)=-\alpha-\frac{\Gamma/2}{k(E-E_0+i\Gamma/2)}. \quad (134.14)$$

せまい領域 $|E-E_0|\sim\Gamma$ においては，第2項は振幅 α に比べて大きく，第1項は無視できる．しかしながら共鳴点から遠ざかると，二つの項は同程度になり得る．

---

1) もしも電荷をもつ系による荷電粒子の散乱を問題にするならば，位相 $\delta_l^{(0)}$ に対しては式 (135.11) を用いなければならない．

2) $l\neq 0$ をもち ε に近い E をもつおそい粒子が正の準位 ε によって共鳴散乱されるときの式 (133.15) は，(133.12) の中の共鳴項に完全に対応することを強調しておく．この場合 E_0 および Γ の値は式 (133.16) によって与えられ，E が小さいために位相 $\delta_l^{(0)}$ は小さく，したがって $\exp(2i\delta_l^{(0)})\approx 1$ となる．

3) 散乱を起こす場は距離とともに十分にはやく減少すると仮定している．§145 ではここに述べた結果が，核によるおそい中性子の散乱に適用される．

上に述べた議論では，準位 E_0 自身はあまり小さくはなく，共鳴領域は点 $E=0$ の近傍にはないことが暗々裏に仮定されていた．複合系の最初の準離散準位による共鳴を問題にする場合には，もしもその準位が次の準位までの距離に比べて小さい距離だけ点 $E=0$ から離れているならば ($E_0 \ll D$)，展開式 (134.6) はもはや妥当でなくなる；このことはすでに，一般論により s-散乱に対して期待されるように，$E \to 0$ のとき振幅 (134.14) が一定の極限値に収束しないことにあらわれている．

準離散準位がゼロに近い場合を考察しよう．そのとき共鳴領域において散乱される粒子が十分おそくて，s-散乱のみが重要であることをふたたび仮定する．

波動関数の展開係数 $B_l(E)$ はエネルギー E それ自身のベキでつくられなければならない．点 $E=0$ は関数 $B_l(E)$ の分岐点であり，切れ目の上端から下端へとその点の回りを迂回することにより，$B_l(E)$ は $B_l^*(E)$ に変わる．このことは，上に述べた迂回によって符号を変える $\sqrt{-E}$ のベキを用いて，展開があらわされることを意味している．実の正数 E に対して関数 $B_0(E)$ の展開の最初の項を次の形にあらわそう：

$$B_0(E)=(E-\varepsilon_0+i\gamma\sqrt{E})b_0(E). \tag{134.15}$$

ここで ε_0 と γ は実の定数，$b_0(E)$ はエネルギーの関数で，これも $\sqrt{E}$ のベキで展開されるが，点 $E=0$ の近傍でゼロをもたない[1)]．準離散準位 $E=E_0-i\Gamma/2$ に対しては，非物理的分岐面の下の半平面に接続された因子 $E-\varepsilon_0+i\gamma\sqrt{E}$ がゼロとなることが対応する；したがって，E_0 および Γ を決定するための式

$$E_0-\frac{i}{2}\Gamma-\varepsilon_0+i\gamma\sqrt{E_0-\frac{1}{2}i\Gamma}=0 \tag{134.16}$$

が得られる (E_0 および Γ が正であるために，定数 ε_0 および γ は正でなければならない)．たとえば幅 $\Gamma \ll E_0$ をもつ準位は，定数 ε_0 および γ の間の関係式 $\varepsilon_0 \gg \gamma^2$ に対応する．この場合 (134.16) により，$E_0=\varepsilon_0$，$\Gamma=2\gamma\sqrt{\varepsilon_0}$ が得られる．

式 (134.15) はこの場合，式 (134.6) にとってかわる；それに続く諸式も同様に変更されなければならない (いたるところで E_0 を ε_0 に，Γ を $2\gamma\sqrt{E}$ に置きかえなければならない)．したがって，散乱振幅に対しては (134.14) のかわ

1) 関数 $b_0(E)$ は (134.9) によりポテンシャル散乱の位相を決定する．おそい粒子の散乱の場合，その展開の第1項は：

$$b_0(E)=\text{const}\cdot i(1+i\alpha k).$$

りに次式が得られる：

$$f=-\alpha-\frac{\hbar\gamma}{\sqrt{2m}(E-\varepsilon_0+i\gamma\sqrt{E})} \tag{134.17}$$

(ただし，ここで $k=\sqrt{2mE}/\hbar$ と置いた．m は粒子および散乱系の換算質量である)．$E\to0$ のときこの振幅は期待されるように一定の極限値に収束する（それによって展開式 (134.15) の形が証明される)．

(134.17) の形の式はまた，定数 ε_0 および γ の間の適当な関係のときに得られる複合系のゼロに近い真の離散準位の場合をも含んでいることを強調しておこう．もしも $|\varepsilon_0|\ll\gamma^2$ ならば，エネルギー $E\ll\gamma^2$ に対して共鳴項の分母の中で第１項 (E) を無視することができる．

またポテンシャル散乱の振幅 α をも無視すれば，次式を得る：

$$f=-\left[ik-\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\frac{\varepsilon_0}{\gamma}\right]^{-1}.$$

これは式 (133.7) と一致している（したがって $\kappa=-\sqrt{2m}\varepsilon_0/\hbar\gamma$ である)．それは定数 κ が正であるか負であるかにしたがって，真の離散準位あるいは仮想的な離散準位である，準位 $E=\varepsilon_0^2/\gamma^2$ における共鳴に対応している．

§ 135. ラザフォードの公式

クーロン場における散乱は物理的応用の観点から特別の興味がもたれる．またこの場合，衝突に関する量子力学的問題を正確に解くことができるという点でも興味がある．

特定の方向が存在するとき（この場合には粒子の入射方向)，クーロン場におけるシュレーディンガー方程式は放物座標 ξ, η, φ を用いて解くのが便利である (§37)．中心場における粒子の散乱の問題は軸対称性をもっている．したがって波動関数 ψ は角度 φ に依存しない．シュレーディンガーの方程式 (37.6) の特解を次の形に書こう：

$$\psi=f_1(\xi)f_2(\eta) \tag{135.1}$$

((37.7) で $m=0$ と置いたもの)．したがって，変数分離を行なった後，方程式 (37.8) で $m=0$ と置いたものが得られる[1]：

---

1) 本節ではクーロン単位を用いる（第１巻139頁の脚注参照)．

$$\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{df_1}{d\xi}\right)+\left[\frac{k^2}{4}\xi-\beta_1\right]f_1=0,$$
$$\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{df_2}{d\eta}\right)+\left[\frac{k^2}{4}\eta-\beta_2\right]f_2=0;\quad \beta_1+\beta_2=1. \tag{135.2}$$

散乱される粒子のエネルギーはもちろん正である；われわれは $E=k^2/2$ と置いた．方程式 (135.2) の中の符号は斥力場の場合に対応するものである；引力場における散乱断面積に対しては全く同じ最終結果が得られる．

われわれは，負の z および大きい r に対して次のような平面波の形をもつようなシュレーディンガー方程式の解を求めなければならない：

$$-\infty<z<0,\ r\to\infty \text{ のとき } \quad \psi\sim e^{ikz}.$$

これは z 軸の正方向に入射する粒子に対応している．以下の議論で明らかなように，課せられた条件は (135.1) の（異なる値 β_1, β_2 をもつ解の和によってではなく）一つの特解によって満足させることができる．

放物座標では，この条件は次の形をもつ：

$$\eta\to\infty \text{ およびあらゆる } \xi \text{ に対して } \quad \psi\sim e^{ik(\xi-\eta)/2}.$$

この条件は

$$f_1(\xi)=e^{ik\xi/2} \tag{135.3}$$

のときにのみ満足される．そして $f_2(\eta)$ は次の条件に従う：

$$\eta\to\infty \text{ のとき } \quad f_2(\eta)\sim e^{-ik\eta/2}. \tag{135.4}$$

(135.3) を (135.2) の最初の方程式に代入すると，この関数は，もしも $\beta_1=ik/2$ ならば方程式を実際に満足することがわかる．すると (135.2) の第2の方程式は $\beta_2=1-\beta_1$ と置くと次の形をもつ：

$$\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{df_2}{d\eta}\right)+\left(\frac{k^2}{4}\eta-1+\frac{ik}{2}\right)f_2=0.$$

これの解を次の形に求めよう：

$$f_2(\eta)=e^{-ik\eta/2}w(\eta). \tag{135.5}$$

ここで関数 $w(\eta)$ は $\eta\to\infty$ のとき一定の極限値に収束する．$w(\eta)$ に対しては次の方程式を得る：

$$\eta w''+(1-ik\eta)w'-w=0. \tag{135.6}$$

これは新しい変数 $\eta_1=ik\eta$ を導入することにより，パラメーター $\alpha=-i/k$, $\gamma=1$ をもつ合流型超幾何関数の方程式に帰着される．われわれは方程式 (135.

6) の解のうちで，それに $f_1(\xi)$ を掛けると，収束する波でなく，発散する（あるいは散乱される）球面波のみを含むような解を選ばなければならない．このような解は次の関数である：

$$w=\mathrm{const}\cdot F\left(-\frac{i}{k},\ 1,\ ik\eta\right).$$

このようにして，得られた式を集めると，散乱を記述するシュレーディンガー方程式の次のような正確な解が求められる：

$$\psi=e^{-\pi/2k}\Gamma\left(1+\frac{i}{k}\right)e^{ik(\xi-\eta)/2}F\left(-\frac{i}{k},\ 1,\ ik\eta\right). \tag{135.7}$$

ψ の規格化定数は，入射平面波が 1 の振幅をもつように選んだ（以下参照）．

この関数において入射波と散乱波とを分離するためには，中心から遠距離におけるそれの形を考察しなければならない．合流型超幾何関数の漸近式 (d. 14) の最初の 2 項を用いると，大きい η に対して次式が得られる：

$$F\left(-\frac{i}{k},\ 1,\ ik\eta\right)\approx\frac{(-ik\eta)^{i/k}}{\Gamma\left(1+\frac{i}{k}\right)}\left(1+\frac{1}{ik^3\eta}\right)+\frac{(ik\eta)^{-i/k}}{\Gamma\left(-\frac{i}{k}\right)}\frac{e^{ik\eta}}{ik\eta}$$

$$=\frac{e^{\pi/2k}}{\Gamma\left(1+\frac{i}{k}\right)}\left(1+\frac{1}{ik^3\eta}\right)e^{(i/k)\log k\eta}-\frac{\frac{i}{k}e^{\pi/2k}}{\Gamma\left(1-\frac{i}{k}\right)}\frac{e^{ik\eta}}{ik\eta}e^{-(i/k)\log k\eta}.$$

これを (135.7) に代入し，球座標 ($\xi-\eta=2z,\ \eta=r-z=r(1-\cos\theta)$) へ移行すれば，波動関数の次のような漸近式が最終的に得られる：

$$\psi=\left[1+\frac{1}{ik^3r(1-\cos\theta)}\right]\exp\left\{ikz+\frac{i}{k}\log\left[kr(1-\cos\theta)\right]\right\}$$
$$+\frac{f(\theta)}{r}\exp\left\{ikr-\frac{i}{k}\log(2kr)\right\}. \tag{135.8}$$

ここで

$$f(\theta)=-\frac{1}{2k^2\sin^2\frac{\theta}{2}}\frac{\Gamma\left(1+\frac{i}{k}\right)}{\Gamma\left(1-\frac{i}{k}\right)}\exp\left(-\frac{2i}{k}\log\sin\frac{\theta}{2}\right) \tag{135.9}$$

である．

(135.8) の第 1 項は入射波をあらわしている．クーロン場はゆっくり減少するため，入射平面波は中心から遠い距離にあってもすでに変形を受けていること

とがわかる；このことは位相の中の対数項の存在および波の振幅の中の $1/r$ の程度の項の存在によって示されている[1]．変形を与える位相の中の対数項は，(135.8) の中の第2項によって記述される散乱球面波の中にもまた存在する．波動関数のふつうの漸近形 (123.3) とのこのような差異はさして重要でない；そのわけは流れの密度に対する補正は $r\to\infty$ のときゼロに収束するからである．

このようにして，散乱の有効断面積 $d\sigma=|f(\theta)|^2do$ に対して式

$$d\sigma=\frac{do}{4k^4\sin^4\dfrac{\theta}{2}}$$

が得られる．あるいは通常の単位を用いて

$$d\sigma=\left(\frac{\alpha}{2mv^2}\right)^2\frac{do}{\sin^4\dfrac{\theta}{2}} \tag{135.10}$$

となる ($v=k\hbar/m$ は粒子の速度)．この式は，古典力学でも導かれる有名な**ラザフォードの公式**と同じものである．このようにクーロン場における散乱に対しては，量子力学も古典力学も同じ結果を与える (N. Mott, W. Gordon, 1928)．ボルンの式 (126.12) も当然同一の式 (135.10) を導出する．

参考までに散乱振幅に対する式 (135.9) を球関数の和の形に書きあらわしておこう．それは (124.5) の中に (36.28) の位相 δ_l を代入することにより得られる．すなわち[2]：

$$\exp\left(2i\delta_l^{\mathrm{coul}}\right)=\frac{\Gamma\left(l+1+\dfrac{i}{k}\right)}{\Gamma\left(l+1-\dfrac{i}{k}\right)}. \tag{135.11}$$

それゆえ次式を得る：

---

1) このような変形の原因は古典的描像においてもすでに明らかにすることができる．もしも (z 軸に平行な) 同一の入射方向をもつ古典的なクーロン放物軌道の組を考察するならば，散乱中心から遠距離において ($z\to-\infty$) それらに垂直な表面の方程式は，容易に示されるように，$z=\mathrm{const}$ ではなく $z+k^{-2}\log k(r-z)=\mathrm{const}$ に収束する．このような表面は (135.8) における入射波の一定位相の表面とちょうど一致する．

2) この式の中の量 δ_l^{coul} は真の（発散する）クーロンの位相に比べてあらゆる l に対して同じ量だけ異なっている．

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_l(2l+1)\frac{\Gamma\left(l+1+\frac{i}{k}\right)}{\Gamma\left(l+1-\frac{i}{k}\right)}P_l(\cos\theta). \qquad (135.12)$$

散乱振幅 (135.9) における符号は斥力クーロン場に対応している．引力場に対しては式 (135.9) はその複素共役に置きかえなければならない．後者の場合，関数 $\Gamma(1-i/k)$ の極において，すなわち Γ-関数の引数が負の整数またはゼロである点において（このとき $\mathrm{Im}\,k>0$ であり，関数 $r\psi$ は無限遠で減衰する），$f(\theta)$ は無限大となる．エネルギーの対応する値は

$$\frac{k^2}{2}=-\frac{1}{2n^2} \quad (n=1,2,3,\cdots)$$

であって，これは引力クーロン場における離散エネルギー準位と一致する (§ 128 参照)．

§ 136. 連続スペクトルの波動関数の系

第5章において中心対称場における運動を考察した際，粒子がエネルギーの確定値の他に，角運動量 $\boldsymbol{l}$ およびそれの投影 m の確定値をもつ定常状態を研究した．これらの状態の離散スペクトルの波動関数 (ψ_{nlm}) および連続スペクトルの波動関数 (ψ_{klm}，エネルギー $\hbar^2k^2/2m$) はあわせて完全系をなし，任意の状態の波動関数はそれらによって展開することができる．しかしこのような系は散乱理論における問題の設定に対して適切でない．この場合，連続スペクトルの波動関数が次のような一定の漸近的な振舞によって特徴づけられるような別の系が便利である：すなわち無限遠で平面波 $\exp(i\boldsymbol{kr})$ および発散球面波が存在する；そしてこれらの状態で粒子は確定したエネルギーはもつが，確定した角運動量の大きさとその投影をもたない．

(123.6) および (123.8) によれば，そのような波動関数は（それらをここでは $\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}$ と書くことにしよう）次式で与えられる：

$$\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}=\frac{1}{2k}\sum_{l=0}^{\infty}i^l(2l+1)e^{i\delta_l}R_{kl}(r)P_l\left(\frac{\boldsymbol{kr}}{kr}\right). \qquad (136.1)$$

ルジャンドル多項式の引数はここでは $\cos\theta=\boldsymbol{kr}/kr$ の形に書いた．このためこの式はもはや座標軸のいかなる定まった選び方にも依存しない（これに反して (123.6) では選び方に依存した．そこでは z 軸は平面波の伝播方向と一致し

ている). ベクトル $\boldsymbol{k}$ にあらゆる可能な値を与えると，われわれは，あとでわかるように，連続スペクトルに対するふつうの規則

$$\int \psi_{\boldsymbol{k}'}^{(+)*}\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}dV=(2\pi)^3\delta(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}) \tag{136.2}$$

によって互いに規格直交化された波動関数の集合を得る.

この証明には[1]，積 $\psi_{\boldsymbol{k}'}^{(+)*}\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}$ が積

$$P_l\left(\frac{\boldsymbol{kr}}{kr}\right)P_{l'}\left(\frac{\boldsymbol{k'r}}{k'r}\right)$$

を含む項の l および l' に関する二重和によって表わされることに注目する. $\boldsymbol{r}$ の方向に関する積分は，式

$$\int P_l\left(\frac{\boldsymbol{kr}}{kr}\right)P_{l'}\left(\frac{\boldsymbol{k'r}}{k'r}\right)do=\delta_{ll'}\frac{4\pi}{2l+1}P_l\left(\frac{\boldsymbol{kk'}}{kk'}\right) \tag{136.3}$$

によって実行される（数学的補遺の式 (c. 12) と比較せよ). この結果次式を得る：

$$\int\psi_{\boldsymbol{k}'}^{(+)*}\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}dV=\frac{\pi}{kk'}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\exp\left[i\delta_l(k)-i\delta_l(k')\right]P_l(\cos\gamma)\int_0^\infty R_{k'l}R_{kl}r^2dr.$$

ここで γ は $\boldsymbol{k}$ と $\boldsymbol{k}'$ の間の角である. しかしながら動径関数 R_{kl} は

$$\int_0^\infty R_{k'l}R_{kl}r^2dr=2\pi\delta(k'-k)$$

によって規格直交化されている. したがって，積分の前の係数で $k=k'$ と置くことができる；また関係式 (124. 3) を用いると，次式が得られる：

$$\int\psi_{\boldsymbol{k}'}^{(+)*}\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}dV=\frac{2\pi^2}{k^2}\delta(k'-k)\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\gamma)$$
$$=\frac{8\pi^2}{k^2}\delta(k'-k)\delta(1-\cos\gamma).$$

右辺の式はあらゆる $\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{k}'$ に対してゼロであり，$2\pi k^2\sin\gamma d\gamma dk/(2\pi)^3$ を掛けて，$\boldsymbol{k}$-空間のすべてにわたって積分すると 1 となる；したがって式 (136. 2) が証明された.

関数系 $\psi_{\boldsymbol{k}}^{+}$ の他に，無限遠で平面波および収束球面波が存在する状態に対応

---

1) 本質的には関数 $\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}$ の相互直交性だけをとくに証明する必要がある. それの規格化については，関数の漸近形（§ 21 参照）から直接導くことができる. この意味で，(136. 2) の妥当性は，$r\to\infty$ のときこれらの関数のうちで減衰しない唯一つの項は $\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}\approx e^{i\boldsymbol{kr}}$ であることからすでに明らかである.

するような関数系を導入することができる．これらの関数は $\psi_{\boldsymbol{k}}^{(-)}$ であらわすとして，$\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}$ から

$$\psi_{\boldsymbol{k}}^{(-)}=\psi_{-\boldsymbol{k}}^{(+)*} \tag{136.4}$$

によって直接求めることができる．実際に複素共役をとると発散波 (e^{ikr}/r) から収束波 (e^{-ikr}/r) が得られ，平面波は $e^{-i\boldsymbol{kr}}$ の形をとる．$\boldsymbol{k}$ の前の定義（平面波 $e^{i\boldsymbol{kr}}$）を保つためには，(136.4) においてなされるように，$\boldsymbol{k}$ を $-\boldsymbol{k}$ に変えなければならない．$P_l(-\cos\theta)=(-1)^l P_l(\cos\theta)$ であることに注意すれば，(136.1) から次式を得る：

$$\psi_{\boldsymbol{k}}^{(-)}=\frac{1}{2k}\sum_{l=0}^{\infty} i^l(2l+1)e^{-i\delta_l}R_{kl}(r)P_l\left(\frac{\boldsymbol{kr}}{kr}\right) \tag{136.5}$$

クーロン場の場合は非常に重要である．ここで関数 $\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}$（および $\psi_{\boldsymbol{k}}^{(-)}$）は式 (135.7) から直接求められて，まとまった形に書くことができる．放物座標を次のようにあらわそう：

$$\frac{k}{2}(\xi-\eta)=kz=\boldsymbol{kr}, \qquad k\eta=k(r-z)=kr-\boldsymbol{kr}.$$

したがって斥力クーロン場に対して次式を得る[1)]：

$$\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}=e^{-\pi/2k}\Gamma\left(1+\frac{i}{k}\right)e^{i\boldsymbol{kr}}F\left(-\frac{i}{k},\ 1,\ i(kr-\boldsymbol{kr})\right), \tag{136.6}$$

$$\psi_{\boldsymbol{k}}^{(-)}=e^{-\pi/2k}\Gamma\left(1-\frac{i}{k}\right)e^{i\boldsymbol{kr}}F\left(\frac{i}{k},\ 1,\ -i(kr+\boldsymbol{kr})\right). \tag{136.7}$$

引力クーロン場に対する波動関数は，k および r の符号を同時に変えることにより得られる：

$$\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}=e^{\pi/2k}\Gamma\left(1-\frac{i}{k}\right)e^{i\boldsymbol{kr}}F\left(\frac{i}{k},\ 1,\ i(kr-\boldsymbol{kr})\right), \tag{136.8}$$

$$\psi_{\boldsymbol{k}}^{(-)}=e^{\pi/2k}\Gamma\left(1+\frac{i}{k}\right)e^{i\boldsymbol{kr}}F\left(-\frac{i}{k},\ 1,\ -i(kr+\boldsymbol{kr})\right). \tag{136.9}$$

座標原点付近の粒子の運動におよぼすクーロン場の作用の特徴は，点 $r=0$ における $\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}$ または $\psi_{\boldsymbol{k}}^{(-)}$ の絶対値の自乗と自由運動の波動関数 $\psi_{\boldsymbol{k}}=e^{i\boldsymbol{kr}}$ の絶対値の自乗との比によって与えられる．式

$$\Gamma\left(1+\frac{i}{k}\right)\Gamma\left(1-\frac{i}{k}\right)=\frac{i}{k}\Gamma\left(\frac{i}{k}\right)\Gamma\left(1-\frac{i}{k}\right)=\frac{\pi}{k\sinh\dfrac{\pi}{k}}$$

---

1) クーロン単位を用いる．

を用いると，斥力場に対しては

$$\frac{|\psi_k^{(+)}(0)|^2}{|\psi_k|^2}=\frac{|\psi_k^{(-)}(0)|^2}{|\psi_k|^2}=\frac{2\pi}{k(e^{2\pi/k}-1)} \tag{136.10}$$

引力場に対しては

$$\frac{|\psi_k^{(+)}(0)|^2}{|\psi_k|^2}=\frac{|\psi_k^{(-)}(0)|^2}{|\psi_k|^2}=\frac{2\pi}{k(1-e^{-2\pi/k})} \tag{136.11}$$

が容易に求められる．

関数 $\psi_k^{(+)}$ および $\psi_k^{(-)}$ は連続スペクトルに摂動論を適用することに関連した問題において重要な役割を果たす．ある摂動 $\hat{V}$ の結果として粒子が連続スペクトルの状態間の遷移を受けると仮定する．遷移確率は行列要素

$$\int\psi_f^*\hat{V}\psi_i dV \tag{136.12}$$

によって決定される．次の問題が生じる：無限遠で運動量 $\hbar\boldsymbol{k}$ をもつ状態から運動量 $\hbar\boldsymbol{k}'$ をもつ状態への粒子の遷移振幅を得るためには，初め (ψ_i) および終りの波動関数 (ψ_f) として波動方程式のどの解をとらなければならないかということである[1)]．このためには

$$\psi_i=\psi_k^{(+)},\qquad \psi_f=\psi_{k'}^{(-)} \tag{136.13}$$

を選ばなければならないことを示そう（A. Sommerfeld, 1931)．

このことはこの問題が，摂動 $\hat{V}$ に関してのみならず，粒子がその中を運動している場 $U(r)$ に関しても適用される摂動論の方法によってどのように解かれるかを考察すれば明らかとなる．（U に関して）ゼロ次近似では，行列要素 (136.12) は次の形をもつ：

$$V_{k'k}=\int e^{-i\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r}}\hat{V}e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}dV.$$

（U に関して）次の近似では，この積分は級数で置きかえられ，その各項は次の形の積分で表わされる：

$$\int\frac{V_{k'k_1}U_{k_1k_2}\cdots U_{k_nk}}{(E_k-E_{k_1}+i0)\cdots(E_k-E_{k_n}+i0)}d^3k_1\cdots d^3k_n$$

---

1) このような過程の例は，電子が静止している重い核と衝突して，光子を放射し，電子の運動エネルギーと方向を変える場合である．摂動 $\hat{V}$ は電子と放射場との相互作用であり，核のクーロン場は関数 $\psi_k^{(+)}$ および $\psi_k^{(-)}$ がそれに対して決められるような場 U である（第Ⅳ巻『量子電気力学』§90, 93 参照)．別の例は電子が原子と衝突して，原子をイオン化させる場合である（§148，問題4参照)．

(§ 43 および § 130 と比較せよ). 分子には (いろいろな順序で並べられた) 非摂動平面波に関する行列要素が並び, すべての極は積分に際して同一の定まった規則に従って迂回される. 他方この級数は, 場 U に関する摂動論の級数の形であらわされる波動関数 ψ_i および ψ_f をもつ行列要素 (136.12) として得ることができる. 結果として, すべての極が同じ規則で迂回されるような積分の和が得られなければならないという事実は, 結局 ψ_i および ψ_f^* を表わす級数項の中の極は同じような規則で迂回されることを意味している. しかしながら, もしも波動方程式をこの迂回の規則をもつ摂動論によって解くならば, (平面波と並んで) 発散波を漸近形としてそれ自身に含む解が自動的に得られることになる. いいかえると, (U に関して) ゼロ次近似で

$$\psi_i = e^{ikr}, \qquad \psi_f^* = e^{-ik'r}$$

の形をもっていた波動関数は, それぞれ波動方程式の厳密解 $\psi_k^{(+)}$ および $\psi_{-k'}^{(+)} = (\psi_{k'}^{(-)})^*$ によって置きかえられなければならない. これで (136.13) の規則が証明された.

終りの波動関数として $\psi_{k'}^{(-)}$ を選ぶことは, 離散スペクトルの状態から連続スペクトルの状態への遷移の場合にも適用される (この場合 ψ_i の選び方の問題はもちろん起こらない).

§ 137. 同種粒子の衝突

二つの同種粒子が衝突する場合は特別の考察を必要とする. 粒子の同等性は量子力学において同種粒子の間にはたらく独特の交換相互作用をもたらす. このことは散乱に対しても重要な効果を与える (N. F. Mott, 1930)[1].

2粒子系の軌道波動関数は, 粒子の合成スピンが偶であるか奇であるかによって, それらの粒子に関して対称または反対称でなければならない (§ 62 参照). したがって, ふつうのシュレーディンガー方程式を解いて得られる, 散乱を記述する波動関数は粒子に関して対称化あるいは反対称化されなければならない. 粒子の互換は, それらの粒子を結ぶ動径ベクトルの方向を反転することと同等である. 重心を静止したままの座標系では, このことは r を不変のまま角度 θ を $\pi-\theta$ に変えることを意味する (それに伴って $z=r\cos\theta$ は $-z$ に

1) ここでは前と同様直接のスピン－軌道相互作用は考察しないことにする.

変わる)．したがって，波動関数の漸近式 (123.3) のかわりに次のように書かなければならない：

$$\psi=e^{ikz}\pm e^{-ikz}+\frac{1}{r}e^{ikr}[f(\theta)\pm f(\pi-\theta)]. \qquad (137.1)$$

粒子の同等性のために，もちろんそれらのうちのどちらが散乱し，どちらが散乱されるかということをいうことはできない．重心系では，互いに反対方向に伝播する二つの同一の入射平面波 e^{ikz} および e^{-ikz} が存在する．ところが (137.1) の中の発散波は両粒子の散乱を考慮しており，それを用いて計算される流れは与えられた立体角要素 do の中へどちらかの粒子が散乱される確率を与える．散乱断面積は，この流れと各入射平面波の流れの密度との比で与えられる；すなわち前と同様，波動関数 (137.1) の中の e^{ikr}/r の係数の絶対値の自乗で与えられる．

このようにして，もしも衝突粒子の合成スピンが偶ならば，散乱断面積は次の形をもつ：

$$d\sigma_s=|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2do. \qquad (137.2)$$

そしてもしも奇ならば次の形をもつ：

$$d\sigma_a=|f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2do. \qquad (137.3)$$

干渉項 $f(\theta)f^*(\pi-\theta)+f^*(\theta)f(\pi-\theta)$ が存在していることが交換相互作用に対して特徴的である．もしも古典力学におけるように粒子が互いに異なっているとすると，与えられた立体角要素 do へ粒子のどちらかが散乱される確率は，粒子の一つが角度 θ だけ散乱され，それに反対に運動している粒子が角度 $\pi-\theta$ だけ散乱される確率の単なる和に等しいはずである；いいかえると，断面積は次のようになるであろう：

$$\{|f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2\}do.$$

おそい速度の極限の場合には（粒子の相互作用が距離とともに十分速く減衰するならば)，散乱振幅は角度によらず一定の値に収束する (§132)．

式 (137.2)，(137.3) においては，衝突粒子の合成スピンが確定した値をもつことが仮定されている．もしも粒子が確定したスピン状態にないならば，断面積を決定するためには，すべてのスピン状態が同じ確率をもつとみなして平

均を行なわなければならない．

§62 で示したように，スピン s をもつ 2 粒子系の $(2s+1)^2$ 個の異なるスピン状態の総数のうちで，（もしも s が半整数ならば）$s(2s+1)$ 個の状態が偶の全スピンに，$(s+1)(2s+1)$ 個の状態が奇の全スピンに対応し，あるいは（もしも s が整数ならば）その逆が成り立つ．最初に粒子のスピン s は半整数であると仮定しよう．すると二つの衝突粒子からなる系が偶の s をもつ確率は $\frac{s(2s+1)}{(2s+1)^2}=\frac{s}{2s+1}$ であり，奇の s をもつ確率は $\frac{s+1}{2s+1}$ である．したがって，散乱断面積は次のようになる：

$$d\sigma=\frac{s}{2s+1}d\sigma_s+\frac{s+1}{2s+1}d\sigma_a. \tag{137.4}$$

これに (137.2)，(137.3) を代入すると，次式を得る：

$$d\sigma=\left\{|f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2-\frac{1}{2s+1}[f(\theta)f(\pi-\theta)^*+f(\theta)^*f(\pi-\theta)]\right\}do. \tag{137.5}$$

s が整数である場合も，同様にして次式を得る：

$$d\sigma=\left\{|f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2+\frac{1}{2s+1}[f(\theta)f(\pi-\theta)^*+f(\theta)^*f(\pi-\theta)]\right\}do. \tag{137.6}$$

一例として，クーロン則 $(U=e^2/r)$ に従って相互作用をしている 2 電子の衝突に対する式を書いておこう．式 (135.9) を $s=1/2$ に対する式 (137.5) に代入すると，簡単な計算の後に（ふつうの単位で）

$$d\sigma=\left(\frac{e^2}{m_0v^2}\right)^2\left[\frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}+\frac{1}{\cos^4\frac{\theta}{2}}-\frac{1}{\sin^2\frac{\theta}{2}\cos^2\frac{\theta}{2}}\cos\left(\frac{e^2}{\hbar v}\log\tan^2\frac{\theta}{2}\right)\right]do \tag{137.7}$$

となる（ここで換算質量 $m=m_0/2$ のかわりに電子質量 m_0 を導入した）．もしも速度が十分大きくて $e^2\ll v\hbar$ ならば，この式はいちじるしく簡単化される（これはちょうど，クーロン場に摂動論を適用できるための条件であることに注意せよ）．すると第 3 項の中の余弦は 1 に置きかえられて，次式を得る：

$$d\sigma=\left(\frac{2e^2}{m_0v^2}\right)^2\frac{4-3\sin^2\theta}{\sin^4\theta}do. \tag{137.8}$$

逆の極限の場合，$e^2\gg v\hbar$ は古典力学への移行に対応する（§127 の最後参照）．

式 (137.7) において，この極限移行は非常に奇妙に行なわれる．$e^2 \gg v\hbar$ のとき括弧の中の第 3 項の余弦は急速に振動する関数となる．与えられた各 θ に対して式 (137.7) は散乱断面積として一般にラザフォードの値といちじるしく異なる値を与える．しかしながら，θ の値の小さい範囲で平均するだけで，(137.7) の中の振動する項はゼロとなり，古典的な式へ移行できる．

上に書かれたすべての式は，重心が静止している座標系に属するものである．衝突するまで粒子の一つが静止しているような座標系に移るには，(123.2) によって単に θ を 2ϑ に置きかえればよい．したがって，電子の衝突に対して (137.7) から次式を得る：

$$d\sigma=\left(\frac{2e^2}{m_0v^2}\right)^2\left[\frac{1}{\sin^4\vartheta}+\frac{1}{\cos^4\vartheta}-\frac{1}{\sin^2\vartheta\cos^2\vartheta}\cos\left(\frac{e^2}{\hbar v}\log\tan^2\vartheta\right)\right]\cos\vartheta do. \tag{137.9}$$

ここで do は新しい座標系における立体角要素である (θ を 2ϑ に置きかえると，立体角要素 do は $4\cos\vartheta do$ に置きかえなければならない．そのわけは $\sin\theta d\theta d\varphi=4\cos\vartheta\sin\vartheta d\vartheta d\varphi$ だからである)．

問　　題

与えられたスピンの平均値 $\bar{s}_1$ および $\bar{s}_2$ をもつ，スピン 1/2 の二つの同種粒子の散乱断面積を求めよ．

解　粒子の偏極への断面積の依存性は，スカラー $\bar{s}_1\bar{s}_2$ に比例する項で表わされなければならない．$d\sigma$ を $a+b\bar{s}_1\bar{s}_2$ の形に求めよう．非偏極粒子 ($\bar{s}_1=\bar{s}_2=0$) に対して第 2 項は消えて，(137.4) により $d\sigma=a=(d\sigma_s+3d\sigma_a)/4$ である．もしも両粒子が一つの方向に完全に偏極しているならば ($\bar{s}_1\bar{s}_2=1/4$)，系はもちろん $S=1$ をもつ状態にある．この場合には当然 $d\sigma=a+b/4=d\sigma_a$ である．上の二つの等式から a および b を決定して，次式を得る：

$$d\sigma=\frac{1}{4}(d\sigma_s+3d\sigma_a)+(d\sigma_a-d\sigma_s)\bar{s}_1\bar{s}_2.$$

§ 138. 荷電粒子の共鳴散乱

帯電した核粒子の散乱（たとえば陽子による陽子の散乱）においては，短距離に作用する核力の他にゆっくり減少するクーロン相互作用が存在する．この場合に，共鳴散乱の理論は § 133 で記述されたのと同じ方法で組み立てられる．

異なる点はただ，核力の作用範囲の外の領域 ($r\gg a$) における波動関数として，自由運動の方程式 (133.2) の解のかわりに，クーロン場におけるシュレーディンガー方程式の厳密な一般解を用いなければならないことである．この場合，粒子の速度は前と同様十分小さくて，$ka\ll 1$ とみなすことができるものとする；$1/k$ と長さのクーロン単位 $a_c=\hbar^2/mZ_1Z_2e^2$ (m は衝突粒子の換算質量) との比は任意であってかまわない[1]．

斥力クーロン場における $l=0$ をもつ運動では，動径関数 $\chi=rR_0$ に対するシュレーディンガー方程式は

$$\chi''+\left(k^2-\frac{2}{r}\right)\chi=0 \tag{138.1}$$

である (ここでクーロン単位を用いる)．§36 では $r=0$ で χ/r が有限であるという要求に従うこの方程式の解を求めた．この解をいま F_0 であらわすことにすると，次の形をもつ ((36.27)，(36.28) 参照)：

$$F_0=Ae^{ikr}krF\left(\frac{i}{k}+1,\ 2,\ -2ikr\right),\qquad A^2=\frac{2\pi/k}{e^{2\pi/k}-1}. \tag{138.2}$$

遠距離におけるこの関数の漸近形は

$$F_0\approx\sin\left(kr-\frac{1}{k}\log 2\,kr+\delta_0^{\mathrm{coul}}\right),\qquad \delta_0^{\mathrm{coul}}=\arg\Gamma\left(1+\frac{i}{k}\right) \tag{138.3}$$

となり，小さい r ($kr\ll 1$，$r\ll 1$) に対する展開の第 1 項は，

$$F_0=Akr(1+r+\cdots) \tag{138.4}$$

となる．しかしながら変化する境界条件に対して，原点における関数の振舞いは重要ではなくなる．われわれにとって必要なのは方程式 (138.1) の一般解であって，それは二つの独立な積分の線形結合によってあらわされる．

(138.2) の中の合流型超幾何関数のパラメーターは，(パラメーター $\gamma=2$ は整数なので) 数学的補遺の § d の終りに示したような場合を扱うことになる．そこで示した議論の通り，方程式 (138.1) の第 2 の積分が得られる．そのため

---

1) 以下に記述する理論はエリ・デ・ランダウ (Л. Д. Ландау) およびヤ・ア・スマロジンスキー (Я. А. Смородинский) (1944) によるものである．

には，(138.2) の中の関数 F を，それらの和が (d.14) に従って合流型超幾何関数を与えるような2項の，ある別の線形結合で置きかえればよい．このような線形結合としてこれらの項の差を選べば，方程式 (138.1) の第2の独立解が次の形に得られる[1]（それを G_0 であらわそう）：

$$G_0=2\,\mathrm{Im}\,\frac{Ae^{-ikr}kr}{\Gamma\left(1+\frac{i}{k}\right)}(-2ikr)^{-1+(i/k)}G\left(1-\frac{i}{k},\ -\frac{i}{k},\ -2ikr\right) \tag{138.5}$$

（これに対して関数 F_0 は同じ式の実部で与えられる）．遠距離における漸近形は

$$G_0\approx\cos\left(kr-\frac{1}{k}\log 2kr+\delta_0^{\mathrm{coul}}\right) \tag{138.6}$$

で，小さい r に対する展開の最初の項は

$$G_0=\frac{1}{A}\{1+2r[\log 2r+2C-1+h(k)]+\cdots\} \tag{138.7}$$

となる．ここで $C=0.577\cdots$ はオイラーの定数で，$h(k)$ は関数

$$h(k)=\mathrm{Re}\,\psi\left(-\frac{i}{k}\right)+\log k \tag{138.8}$$

をあらわしている（ここで $\psi(z)=\Gamma'(z)/\Gamma(z)$ は Γ-関数の対数微分である）[2]．

方程式 (138.1) の一般解は，和

$$\chi=\mathrm{const}\cdot(F_0\cot\delta_0+G_0) \tag{138.9}$$

の形に書ける．ここで $\cot\delta_0$ は定数である．この定数のとりかたは，この解の漸近形が

$$\chi\backsim\sin\left(kr-\frac{1}{k}\log 2kr+\delta_0^{\mathrm{coul}}+\delta_0\right) \tag{138.10}$$

となるように選んだ．このようなわけで，δ_0 は波動関数の位相の短距離力に基づく付加的なずれをあらわす．われわれはそれを境界条件 $(\chi'/\chi)|_{r\to 0}=\mathrm{const}$ にあらわれる定数と結びつけなければならない．この境界条件は核力の作用範囲

---

1) 関数 F_0 および G_0 は（$l\neq 0$ に対して同様に定義される関数 F_l および G_l と同じように）それぞれ正則および非正則クーロン関数と呼ばれる．

2) 展開式 (138.7) は，(138.5) から展開式 (d.17) を用いて得られる．この場合，よく知られた関係式

$$\psi(1+z)=\psi(z)+\frac{1}{z}$$

（これは $\Gamma(z+1)=z\Gamma(z)$ から容易に得られる）および $\psi(1)=-C$, $\psi(2)=-C+1$ の値を用いる．

における波動関数の考察のかわりをなすものである．しかしながら，$r\to 0$ のとき対数微分 χ'/χ が（$\log r$ のように）発散するため，この条件は今度はゼロに対してではなく，ある十分小さいがしかしそれでも有限の値 $r=\rho$ にも適用されなければならない．（式 (138.4) および (138.7) を用いて）微分 $\chi'(\rho)/\chi(\rho)$ を計算し，それを定数に等しいと置いて，次の形の境界条件が得られる：

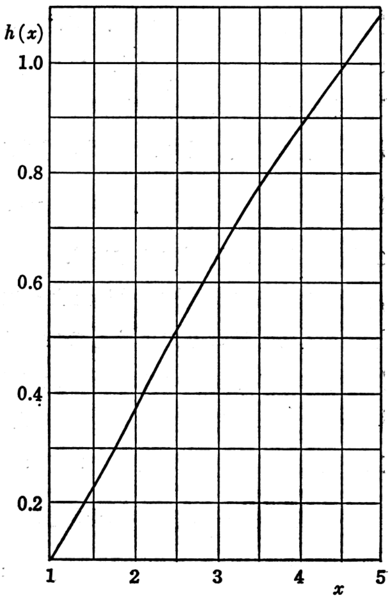
$$kA^2\cot\delta_0+2[\log 2\rho+2C+h(k)]=\mathrm{const.}$$

等式の左辺には k に依存しない定数 $2\log 2\rho+4C$ が含まれている；それを右辺の const に含めて，この後それを $-\kappa$ とあらわすことにしよう．その結果，$\cot\delta_0$ に対する最終的な式が得られて，それをいまふつうの単位で書くと：

$$\cot\delta_0=-\frac{1}{\pi}(e^{2\pi/ka_c}-1)\left[h(ka_c)+\frac{\kappa a_c}{2}\right] \tag{138.11}$$

（$1/a_c\to 0$ の極限では，すなわち非荷電粒子へ移行すると，式 (138.11) は関係式 $\cot\delta_0=-\kappa/k$ となって，これは (133.6) と同じである）．

第49図に関数 $h(k)$ のグラフを示す[1]．



第 49 図

1）関数 $h(k)$ を計算するには，式

$$h(k)=k^{-2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n(n^2+k^{-2})}-C+\log k$$

を用いることができる．これは次式により容易に得られる：

$$\psi(z)=-C-\frac{1}{z}+z\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n(n+z)}.$$

(Whittaker and Watson. *Course of Modern Analysis*, Cambridge, 1944, § 12.16 参照).

関数 $h(k)$ の極限の式は：

$$k\ll 1 \text{ に対して } h(k)\approx\frac{k^2}{12},\qquad k\gg 1 \text{ に対して } h(k)=-C+\log k+\frac{1.2}{k^2}$$

となる（あとの式は $k>2.5$ に対してさえも誤差 4% 以下の正確な $h(k)$ の値を与える）．

このようなわけで，クーロン相互作用が存在すると，この《定数》は次のような値をもつことがわかる：

$$\frac{2\pi\cot\delta_0}{a_c(e^{2\pi/ka_c}-1)}+\frac{2}{a_c}h(ka_c)=-\kappa. \qquad (138.12)$$

ここで《定数》という言葉を括弧の中に入れたわけは，定数 κ は実際に，短距離力の性質に依存したある関数を小さい値 ka のベキで展開したその第1項をあらわしているからである．小さいエネルギーにおける共鳴は §133 で示したように，定数 κ が異常に小さい値をもつ場合に対応している．したがって精度をよくするためには，《正常な》値の程度をもつ係数を含む展開式のその次の項（$\sim k^2$）をも考慮しなければならない．すなわち (138.12) の中で $-\kappa$ を

$$-\kappa_0+\frac{1}{2}r_0k^2$$

に置きかえなければならない[1]．

共鳴の存在は §133 で示したように，系の真の，あるいは仮想的の離散束縛状態が存在することによるものである．準位が真のものか仮想的のものかの規準は前と同じく定数 κ の符号による[2]．

波動関数の全体の位相のずれは (138.10) によって，和 $\delta_l^{\mathrm{coul}}+\delta_l$ である．すると散乱振幅は次式のようになる：

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)[\exp(2i\delta_l^{\mathrm{coul}}+2i\delta_l)-1]P_l(\cos\theta) \qquad (138.13)$$

角括弧の中の差は次の形に書かれる：

$$\exp(2i\delta_l^{\mathrm{coul}}+2i\delta_l)-1=[\exp(2i\delta_l^{\mathrm{coul}})-1]+[\exp(2i\delta_l^{\mathrm{coul}})(e^{2i\delta_l}-1)] \qquad (138.14)$$

クーロン位相 δ_l^{coul} はあらゆる l に対して散乱振幅に同程度の大きさの寄与をなす．ところが短距離力による位相 δ_l は，（小さいエネルギーに対して）$l\neq 0$ のとき小さい．したがって (138.14) を (138.13) に代入したとき，和のあらゆる項の中で (138.14) の第1の括弧を残す．これらの項の和はクーロン散乱振

1) 陽子の陽子による散乱に対する定数 $\alpha=1/\kappa_0$ および r_0 の値を示しておこう：$\alpha=-7.8\times10^{-13}$ cm，$r_0=2.8\times10^{-13}$ cm（長さのクーロン単位は $2\hbar^2/m_pe^2=57.6\times10^{-13}$ cm である）．これらの値は反平行スピンをもつ一対の陽子に対するものである（平行スピンに対して2陽子系はパウリの原理のために一般に s 状態にあることはできない）．

2) エリ・デ・ランダウとヤ・ア・スマロジンスキーの論文参照（Л. Д. Ландау, Я. А. Смородинский, ЖЭТФ, 14, 269 (1944)）．

幅 (135.9) を与える：

$$f_{\mathrm{coul}}(\theta)=-\frac{1}{2a_ck^2\sin^2\dfrac{\theta}{2}}\exp\left(-\frac{2i}{ka_c}\log\sin\frac{\theta}{2}+2i\delta_0^{\mathrm{coul}}\right). \quad (138.15)$$

ところが (138.14) の第 2 の括弧は $l=0$ をもつ項だけを残す．したがって全散乱振幅は次の形に書ける：

$$f(\theta)=f_{\mathrm{coul}}(\theta)+\frac{1}{2ik}(e^{2i\delta_0}-1)\exp(2i\delta_0^{\mathrm{coul}}) \qquad (138.16)$$

この式の第 2 項は核散乱の振幅と呼ぶことができる．しかしながら，このような分離は絶対的なものでないことを強調しておく；(138.11) による δ_0 の定義により，クーロン相互作用の存在はこの項にも重要な影響を与えているので，この項は非荷電粒子に対する同じ短距離力によるものとまったく異なっていることがわかる．とくに $ka_c\to 0$ のとき，位相 δ_0 およびそれとともに (138.16) の第 2 項のすべては ($\exp(-2\pi/ka_c)$ のように) 指数関数的にゼロに収束する．すなわち核散乱はクーロン斥力によって完全にマスクされる．

散乱断面積において，振幅のこの両部分は互いに干渉する：

$$\frac{d\sigma}{do}=|f(\theta)|^2=\left(\frac{Z_1Z_2e^2}{2mv^2}\right)^2$$
$$\times\left[\frac{1}{\sin^4\dfrac{\theta}{2}}-\frac{4ka_c}{\sin^2\dfrac{\theta}{2}}\sin\delta_0\cos\left(\frac{2}{ka_c}\log\sin\frac{\theta}{2}+\delta_0\right)+4(ka_c)^2\sin^2\delta_0\right] \qquad (138.17)$$

ここで衝突する粒子は異なるものと仮定している；同種粒子に対して散乱振幅は，自乗する前にあらかじめ対称化しておかなければならない (§ 137 参照)．

§ 139. 高速電子と原子との弾性衝突

高速電子と原子との弾性衝突は，もしも入射電子の速度が原子内電子の速度に比べて大きければ，ボルン近似を用いて考察することができる．

電子と原子との間の質量差が大きいため，衝突に際して原子は静止していると考えることができ，重心が静止している座標系は原子が静止している座標系と一致する．すると式 (126.7) の中の $\boldsymbol{p}$ および $\boldsymbol{p}'$ は衝突の前と後の電子の運動量をあらわし，m は電子質量，角度 θ は電子の散乱角 ϑ と一致する．ところ

が (126.7) の中のポテンシャル・エネルギー $U(r)$ に対しては必要な定義を与えなければならない.

§126 では衝突の前と後の自由粒子の波動関数に関して相互作用エネルギーの行列要素 $U_{p'p}$ を計算した. 原子との衝突では原子の内部状態を記述する波動関数をも考慮する必要がある. 弾性衝突では原子の状態は変わらない. したがって $U_{p'p}$ は, 電子の波動関数 ψ_p および $\psi_{p'}$ に関する行列要素として定義されなければならない; それは原子の波動関数に関して対角的である. いいかえると, 式 (126.7) の中の U は, 電子と原子との相互作用のポテンシャル・エネルギーを原子の波動関数について平均したものとして理解しなければならない. それは $e\varphi(r)$ である; ここで $\varphi(r)$ は, 原子の中の電荷の平均分布によって点 $\boldsymbol{r}$ につくられるポテンシャル・エネルギーである.

原子中の電荷分布の密度を $\rho(r)$ であらわすと, ポテンシャル φ に対してポアッソンの方程式を得る:

$$\Delta\varphi=-4\pi\rho(r).$$

求めている行列要素 $U_{p'p}$ は, 本質的には U の (すなわち φ の), 波動ベクトル $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}$ に対応するフーリエ成分である. ポアッソン方程式を各フーリエ成分に別々に適用すると次式を得る:

$$\Delta(\varphi_q e^{i\boldsymbol{qr}})=-q^2\varphi_q e^{i\boldsymbol{qr}}=-4\pi\rho_q e^{i\boldsymbol{qr}}.$$

これから $\varphi_q=4\pi\rho_q/q^2$, つまり

$$\int\varphi e^{-i\boldsymbol{qr}}dV=\frac{4\pi}{q^2}\int\rho e^{-i\boldsymbol{qr}}dV. \tag{139.1}$$

電荷密度 $\rho(\boldsymbol{r})$ は電子の電荷および核の電荷よりなる:

$$\rho=-en(r)+Ze\delta(\boldsymbol{r}).$$

ここで $en(r)$ は原子中の電子の電荷密度である. 上の式に $e^{-i\boldsymbol{qr}}$ を掛けて積分すれば, 次式を得る:

$$\int\rho e^{-i\boldsymbol{qr}}dV=-e\int ne^{-i\boldsymbol{qr}}dV+Ze.$$

このようにしてわれわれに興味のある積分に対して, 式

$$\int Ue^{-i\boldsymbol{qr}}dV=\frac{4\pi e^2}{q^2}\int[Z-F(q)] \tag{139.2}$$

が得られる. ここで量 $F(q)$ は式

$$F(q)=\int ne^{-iqr}dV \qquad (139.3)$$

で与えられ，**原子形状因子**と呼ばれる．それは散乱角および入射電子の速度の関数である．

最後に，(139.2) を (126.7) に代入すると，高速電子の原子による弾性散乱の有効断面積に対する次のような式が最終的に得られる[1]：

$$d\sigma=\frac{4m^2e^4}{\hbar^4q^4}[Z-F(q)]^2do, \qquad q=\frac{2mv}{\hbar}\sin\frac{\vartheta}{2}. \qquad (139.4)$$

$qa_0\ll 1$ の極限の場合を考察しよう．ここで a_0 は原子半径の程度の大きさである．小さい q には小さい散乱角が対応する；すなわち：$\vartheta\ll v_0/v$ である．ここで $v_0\sim\hbar/ma_0$ は原子内電子の速度の程度の大きさである．

$F(q)$ を q のベキ級数で展開しよう．ゼロ次の項は $\int ndV$，つまり原子内電子の総数 Z である．1次の項は $\int \boldsymbol{r}n(r)dV$，つまり原子の双極モーメントの平均値に比例する；この値は恒等的にゼロとなる（§75 参照）．したがって展開を2次の項まで行なわなければならず，その結果

$$Z-F(q)=\frac{q^2}{6}\int nr^2dV$$

を得る；(139.4) に代入すると

$$d\sigma=\left|\frac{me^2}{3\hbar^2}\int nr^2dV\right|^2do \qquad (139.5)$$

を得る．このようにして小さい角度範囲では有効断面積は散乱角に依存せず，原子内電子の核からの距離の自乗平均によって与えられる．

大きい q ($qa_0\gg 1$，つまり $\vartheta\gg v_0/v$) の逆の極限の場合には，(139.3) の中の被積分関数にある因子 e^{-iqr} は急速に振動する関数であり，したがって全積分はほとんどゼロとなる．それゆえ，われわれは Z に比べて $F(q)$ を無視できて，

$$d\sigma=\left(\frac{Ze^2}{2mv^2}\right)^2\frac{do}{\sin^4\dfrac{\vartheta}{2}} \qquad (139.6)$$

となる．つまり，原子核によるラザフォード散乱断面積が得られる．

---

1) われわれは，散乱される高速電子と原子内電子との間の交換効果は無視している；つまり系の波動関数の対称化を行なっていない．このような無視が行なえる妥当性は明らかである：自由粒子の急速に振動している波動関数と《交換積分》の中にある原子内電子の波動関数との間の干渉は，それによる散乱振幅への寄与が小さいという結果を与えている．

また輸送断面積

$$\sigma_{tr}=\int(1-\cos\vartheta)d\sigma \tag{139.7}$$

をも計算しよう．角度 $\vartheta\ll v_0/v$ の範囲では，(139.5) によって

$$d\sigma=\text{const}\cdot\sin\vartheta d\vartheta=\text{const}\cdot\vartheta d\vartheta$$

である．ここで const は ϑ に依存しない．したがって，この範囲では上の積分の中の被積分関数は ϑ^3 に比例し，そのため下限で積分は急速に収束する．ところが $1\gg\vartheta\gg v_0/v$ の範囲では

$$d\sigma\approx\text{const}\ (d\vartheta/\vartheta^3)$$

となり，被積分関数は $1/\vartheta$ に比例し，それゆえ積分 (139.7) は対数的に発散する．

これからわかるように，積分の中で重要な役割を果たすのはこの範囲の角度であって，積分をこの範囲のみに限定できる．積分の下限は v_0/v の程度にとらなければならない．それを $e^2/\gamma\hbar v$ の形に書こう．ここで γ は次元のない定数である．その結果次の式が得られる：

$$\sigma_{tr}=4\pi\left(\frac{Ze^2}{mv^2}\right)^2\log\frac{\gamma\hbar v}{e^2}. \tag{139.8}$$

定数 γ の正確な計算には角度 $\vartheta>v_0/v$ での散乱の考察が必要であって，一般的な形で行なうことができない；σ_{tr} はこの定数の値にわずかに依存している．そのわけは，この定数が対数記号の中に入っており，それに大きな値 $\hbar v/e^2$ が掛けられているからである．

重い原子の形状因子を数値的に決定するには，トーマス＝フェルミの密度分布 $n(r)$ を用いることができる．トーマス＝フェルミ模型では $n(r)$ は次の形をもつことを見た：

$$n(r)=Z^2f\left(\frac{rZ^{1/3}}{b}\right)$$

(この式および以下の式における量は原子単位で測られる)．容易にわかるように，こようのな関数 $n(r)$ を用いて計算される積分 (139.3) は，Z といつも一定の結びつきをもった q を含んでいる：

$$F(q)=Z\varphi(bqZ^{-1/3}). \tag{139.9}$$

第11表には参考のためにすべての原子に対して成り立つ関数 $\varphi(x)$ の値を示し

である[1]．

第11表　トーマス=フェルミ模型に基づく原子形状因子

x	$\varphi(x)$	x	$\varphi(x)$	x	$\varphi(x)$
0	1.000	1.08	0.422	2.17	0.224
0.15	0.922	1.24	0.378	2.32	0.205
0.31	0.796	1.39	0.342	2.48	0.189
0.46	0.684	1.55	0.309	2.64	0.175
0.62	0.589	1.70	0.284	2.79	0.167
0.77	0.522	1.86	0.264	2.94	0.156
0.93	0.469	2.02	0.240		

原子形状因子 (139.9) を用いると有効断面積 (139.4) は次の形をもつ：

$$d\sigma=\frac{4Z^2}{q^4}[1-\varphi(bqZ^{-1/3})]^2do=Z^{2/3}\Phi\left(Z^{-1/3}v\sin\frac{\vartheta}{2}\right)do. \qquad (139.10)$$

ここで $\Phi(x)$ はすべての原子に対して成り立つ新しい関数である． 積分により全有効断面積が得られる．積分において小さい ϑ の範囲が主な役割を果たす．したがって

$$d\sigma\approx Z^{2/3}\Phi(Z^{-1/3}v\vartheta/2)2\pi\vartheta d\vartheta$$

と書ける．そして ϑ に関する積分は無限遠まで拡げることができる：

$$\sigma=2\pi Z^{2/3}\int_0^\infty\Phi\left(Z^{-1/3}\frac{v\vartheta}{2}\right)\vartheta d\vartheta=\frac{8\pi}{v^2}Z^{4/3}\int_0^\infty x\Phi(x)dx.$$

したがって σ は次の形をもつ：

$$\sigma=\mathrm{const}\cdot\frac{Z^{4/3}}{v^2}. \qquad (139.11)$$

同様にして式 (139.8) の中の定数 γ が $Z^{-1/3}$ に比例することが容易にわかる．

問　　題

基底状態にある水素原子による高速電子の弾性散乱の断面積を計算せよ．

解　水素原子の基底状態の波動関数は (原子単位で)． $\psi=e^{-r}/\sqrt{\pi}$ であるので，$n=$

1) 小さい q に対してこの式は適用できないことを考慮する必要がある；このことは nr^2 の積分が実際にはトーマス=フェルミの方法によって計算できないことによるものである (560頁の脚注 1) 参照)．

またトーマス＝フェルミ模型は原子番号とともに原子が系統的な変化を破るような，原子の個々の性質を反映しないことに注意すべきである．

e^{-2r}/π となる．(139.3) の中の角度に関する積分は式 (126.12) を導いたときと同じようにして求められる．その結果

$$F=\frac{4\pi}{q}\int_0^\infty n(r)\sin qr\cdot rdr=\left(1+\frac{q^2}{4}\right)^{-2}$$

となる．これを (139.4) に代入すると

$$d\sigma=\frac{4(8+q^2)^2}{(4+q^2)^4}do$$

が得られる．ここで $q=2v\sin\frac{\vartheta}{2}$ である．全断面積を計算するために，

$$do=2\pi\sin\vartheta d\vartheta=\frac{2\pi}{v^2}qdq$$

と置いて，q に関して 0 から $2v$ まで積分しよう．しかしながら v は大きいと仮定されており，積分は収束するので，上限は無限大に置きかえることができる．その結果次式を得る：

$$\sigma=\frac{7\pi}{3v^2}.$$

輸送断面積は積分

$$\sigma_{tr}=\frac{1}{2v^2}\int q^2d\sigma$$

として計算される．積分変数を $4+q^2=u$ により置きかえ，du/u の項を除くすべてで上限を無限大に置きかえると，次式を得る：

$$\sigma_{tr}=\frac{4\pi}{v^4}\left(\log v+\frac{1}{12}\right).$$

これは (139.8) と同じである．

§ 140. スピン－軌道相互作用があるときの散乱

これまでは相互作用が粒子のスピンに依存しないような粒子の衝突だけを考察してきた．これらの条件ではスピンは一般に散乱過程に影響を与えず，交換効果に基づく間接的な作用も示さない (§ 137).

さて，§ 123 で展開した散乱の一般論を，粒子の相互作用がそれらのスピンに強く依存する場合に一般化しよう．このような場合は核粒子の衝突の際起こる．

つぎのようなもっとも簡単な場合を詳しく考察しよう；すなわち衝突粒子の一つ（はっきりさせるためにこれを入射束の粒子としよう）がスピン 1/2 をもち，他（標的粒子）がスピン 0 をもつ場合である．

系の与えられた（半整数の）全角運動量 j に対して軌道角運動量は二つの値

$l=j\pm 1/2$ しかもつことができない．この l の値には異なる偶奇性の状態が対応している．したがってこの場合，$\boldsymbol{j}$ および偶奇性の保存から軌道角運動量の絶対値の保存が導かれる．

演算子 $\hat{f}$ (§ 125) はここでは系の波動関数の軌道変数ばかりでなく，スピン変数に対しても作用する．それは保存量 $\boldsymbol{l}^2$ の演算子と可換でなければならない．このような演算子のもっとも一般的な形は

$$\hat{f}=\hat{a}+\hat{b}\hat{\boldsymbol{l}}\hat{\boldsymbol{s}} \tag{140.1}$$

である．ここで $\hat{a},\hat{b}$ は $\boldsymbol{l}^2$ のみに依存する軌道演算子である．

S-行列およびそれとともに演算子 $\hat{f}$ の行列は，保存量 l および j（および全角運動量の投影 m）の確定値をもつ状態の波動関数に関して対角的であり，そして対角要素は式（123.15）により波動関数の位相 δ を用いてあらわされる．与えられた l および全角運動量 $j=l+1/2$ および $j=l-1/2$ に対して，$\boldsymbol{ls}$ の固有値はそれぞれ $l/2$ および $-(l+1)/2$ である（(118.5) 参照）．したがって，演算子 $\hat{a}$ および $\hat{b}$ の対角行列要素（それらを a_l および b_l であらわす）を求めるための次の関係が得られる：

$$a_l+\frac{l}{2}b_l=\frac{1}{2ik}(e^{2i\delta_l^+}-1),\quad a_l-\frac{l+1}{2}b_l=\frac{1}{2ik}(e^{2i\delta_l^-}-1). \tag{140.2}$$

ここで位相 δ_l^+ および δ_l^- はそれぞれ $j=l+1/2$ および $j=l-1/2$ をもつ状態に対応する．

しかしながら，われわれに興味があるのは，与えられた l および j をもつ状態に関する演算子 $\hat{f}$ の対角要素それ自身ではなく，入射波および散乱波の方向の関数としての散乱振幅である．この振幅はそれでもまだ演算子であるが，スピン変数に関してのみ作用する；すなわちスピン投影 σ に関して非対角的な演算子である．本節の以下の議論では，このような演算子を記号 $\hat{f}$ であらわすことにする．

この演算子を見いだすためには，(z 軸に沿って）入射する平面波に対応する関数 (125.17) に演算子 (140.1) を作用させなければならない．したがって：

$$\hat{f}=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(a_l+b_l\hat{\boldsymbol{l}}\hat{\boldsymbol{s}})P_l(\cos\theta). \tag{140.3}$$

ここで関数 $P_l(\cos\theta)$ に対する演算子 $\hat{\boldsymbol{l}}\hat{\boldsymbol{s}}$ の作用の結果を計算しなければならない．これを行なうには

$$\hat{\boldsymbol{l}}\hat{\boldsymbol{s}}=\frac{1}{2}(\hat{l}_+\hat{s}_-+\hat{l}_-\hat{s}_+)+\hat{l}_z\hat{s}_z$$

と書いて（(29.11) 参照），演算子 $\hat{l}_\pm$ の行列要素に対する式 (27.12) を用いるとよい；もっと簡単には演算子の表式 (26.14)，(26.15) を直接用いることができる．簡単な計算の結果，

$$\hat{\boldsymbol{l}}\hat{\boldsymbol{s}}P_l(\cos\theta)=i\boldsymbol{\nu}\hat{\boldsymbol{s}}P_l^1(\cos\theta)$$

を得る．ここで，P_l^1 はルジャンドル陪多項式，$\boldsymbol{\nu}$ は $[\boldsymbol{nn}']$ の方向の単位ベクトルで，これは散乱面に垂直である（$\boldsymbol{n}$ は z 軸に沿った入射方向であり，$\boldsymbol{n}'$ は球角 θ,φ によって定義される散乱方向である）．

(140.2) から a_l, b_l を決定し，(140.3) に代入すれば，最終的に次式が得られる：

$$\hat{f}=A+2B\boldsymbol{\nu}\hat{\boldsymbol{s}}. \tag{140.4}$$

$$A=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}[(l+1)(e^{2i\delta_l^+}-1)+l(e^{2i\delta_l^-}-1)]P_l(\cos\theta),$$
$$B=\frac{1}{2k}\sum_{l=1}^{\infty}(e^{2i\delta_l^+}-e^{2i\delta_l^-})P_l^1(\cos\theta). \tag{140.5}$$

この演算子の行列要素は，初期状態 (σ) および終状態 (σ') におけるスピン投影の確定値をもつ散乱振幅を与える．σ' のあらゆる可能な値に関して和をとり，（入射粒子束の）初期状態における σ の異なる値の確率に関して平均をとった断面積を考察しよう．このような断面積は

$$d\sigma=\overline{(f^+f)_{\sigma\sigma}}do \tag{140.6}$$

で与えられる．ここで積 $\hat{f}^+\hat{f}$ の対角行列要素をとることによって終状態に関する和が行なわれた．ここで上の線は初期状態に関する平均をあらわしている[1]．もしも初期状態においてスピンのあらゆる方向が等しい確率をもつならば，この平均は行列の跡をとることに帰着される（そしてスピン投影 σ の可能な値の数で割らなければならない）：

$$d\sigma=\frac{1}{2}\mathrm{Sp}\,(f^+f)do. \tag{140.7}$$

1）もしも遷移 $0\to n$ に対するある演算子の行列要素の絶対値の自乗 $|f_{0n}|^2$ について終状態 n に関する和をとるならば，次式が得られる：

$$\sum_n|f_{0n}|^2=\sum_n f_{0n}(f_{0n})^*=\sum_n f_{0n}(f^+)_{n0}=(ff^+)_{00}.$$

誤解を避けるために強調しておくが，(140.6) および以下の議論で共役記号 $^+$ はスピン演算子としての $\hat{f}$ に対するものであって，たとえば $\boldsymbol{n}$ および $\boldsymbol{n}'$ の転置を意味するものではない．

(140.4) を (140.6) に代入すると自乗 $(\boldsymbol{\nu s})^2$ の平均値は $\boldsymbol{\nu}^2\boldsymbol{s}^2/3=s(s+1)/3=1/4$ と計算される．その結果

$$\frac{d\sigma}{do}=|A|^2+|B|^2+2\,\mathrm{Re}\,(AB^*)\boldsymbol{\nu P} \qquad (140.8)$$

が得られる．ここで $\boldsymbol{P}=2\boldsymbol{s}$ は粒子束の最初の偏極をあらわし，これは初期状態における平均スピンとその可能な最大値 (1/2) との比として定義される．スピン 1/2 の場合にベクトル $\bar{\boldsymbol{s}}$ はスピン状態を完全に特徴づけることを想起せよ (§59).

入射粒子束の偏極は方位角に対して散乱の非対称性をもたらすことに注意しよう：断面積 (140.8) の最後の項の中にある因子 $\boldsymbol{\nu P}$ のため，この断面積は極角 θ のみならず，ベクトル $\boldsymbol{n}'$ と $\boldsymbol{n}$ との間の方位角 φ にも依存する（ただし，偏極方向が $\boldsymbol{\nu}$ と垂直でない，すなわち $\boldsymbol{\nu P}\neq 0$ であればである).

散乱された粒子の偏極は次の式で計算できる：

$$\boldsymbol{P}'=\frac{2\overline{(f^+\boldsymbol{s}f)_{\sigma\sigma}}}{\overline{(f^+f)_{\sigma\sigma}}}. \qquad (140.9)$$

したがって，もしも初期状態が偏極していないならば ($\boldsymbol{P}=0$)，簡単な計算の結果

$$\boldsymbol{P}'=\frac{2\,\mathrm{Re}\,(AB^*)}{|A|^2+|B|^2}\boldsymbol{\nu} \qquad (140.10)$$

となる．このようにして，散乱の結果，一般的にいって散乱面に垂直な方向の偏極があらわれる．しかしながら，この効果はボルン近似には存在しないことを強調しておく：もしもあらゆる位相 δ が小さければ，位相に関して 1 次の近似では係数 A は実であり，B は純虚数であり，したがって $\mathrm{Re}\,(AB^*)=0$ となる．

(140.10) の偏極 $\boldsymbol{P}'$ が $\boldsymbol{\nu}$ と同じ方向にあるという事実は前もって明らかである：$\boldsymbol{P}'$ は軸性ベクトルであり，$\boldsymbol{\nu}$ は与えられた配置の中にある極性ベクトル $\boldsymbol{n}$ および $\boldsymbol{n}'$ からつくられるただ一つの軸性ベクトルだからである．したがって，スピン 1/2 をもつ非偏極粒子束が任意のスピン（しかしゼロでない）をもつ非偏極核からなる標的によって散乱されたときに生ずる偏極もまた，これと同じ

性質をもつことは明らかである[1].

スピンが存在するときの散乱に対して相反定理を定式化するには，時間反転によって運動量のみならず角運動量も符号が変わることを考慮すべきである．したがって，時間反転に関する散乱の対称性はこの場合，次のような異なる過程の振幅の間の等式によってあらわされなければならない：すなわち，初期状態と終状態の交換および運動方向の反転をとるだけでなく，両状態の粒子のスピン投影の符号の反転をとる点が互いに異なる過程である．しかしながらこの場合，これらの振幅の符号は，時間反転によって（60.3）の通りスピン波動関数が因子 $(-1)^{s-\sigma}$ だけ変わるという点で異なっている．このような事情のため，相反定理は次のように定式化されなければならない[2]：

$$f(\sigma_1,\sigma_2,\boldsymbol{n}\,;\,\sigma_1',\sigma_2',\boldsymbol{n}')$$
$$=(-1)^{\Sigma(s-\sigma)}f(-\sigma_1',-\sigma_2',-\boldsymbol{n}'\,;\,-\sigma_1,-\sigma_2,-\boldsymbol{n}). \quad (140.11)$$

ここで $f(\sigma_1,\sigma_2,\boldsymbol{n}\,;\,\sigma_1',\sigma_2',\boldsymbol{n}')$ は散乱粒子のスピン投影が値 σ_1,σ_2 から値 σ_1',σ_2' へ変わる散乱振幅である；指数の中の和は散乱前と後の両粒子についてとるものとする．

ボルン近似においては散乱は付加的な対称性をもっている；時間反転のときのように（§126参照）粒子の運動量とスピン投影の符号は不変のままで，初期状態と終状態を交換することによって得られる互いに異なる過程の確率は同じであることがわかる．この性質を上の相反定理と結びつけると，あらゆる運動量とスピン投影とを初期状態と終状態について交換することなく，それらの符号を反転することに対して，散乱は対称であることがわかる．これから容易に結論されるように，ボルン近似では，非偏極標的による任意の非偏極粒子束の散乱において偏極を生ずることはあり得ない．実際に上で述べた変換に対して偏極ベクトル $\boldsymbol{P}$ は符号を変えるが，$\boldsymbol{P}$ の方向にある唯一のベクトル $[\boldsymbol{kk}']$ は

1）ここで考えているのはスピン方向の完全な無秩序配列をもつ核からなる標的のことである．$s>1/2$ に対してスピン・ベクトルの平均値はスピン状態を完全には決定しないので，その値がゼロであってもスピンの秩序が完全にないとはいえないことを想起せよ．

2）この関係の導き方は，式（125.12）の導き方と同様である．この場合，収束波および発散波の振幅にはスピン因子が含まれなければならず，（125.10）のかわりに条件 $\hat{K}^{-1}\hat{\tilde{S}}\hat{K}=\hat{S}$ が得られる；ここで $\hat{K}$ は空間反転を作用するだけでなく，（60.3）に従ってスピン状態を変化させる演算子である．

不変である．このようなわけで，スピン0の粒子によるスピン1/2の粒子の散乱に対して上に述べた性質は，実際に一般的な性質をもっている．

衝突粒子が任意のスピンをもつ場合には，角度分布に対する一般式は非常に複雑となるので，ここではそれを導くことはよそう．そのかわりそれらの分布を決定するパラメーターの数だけを計算しよう．

上で考察したスピン1/2と0をもつ粒子の衝突の場合は特に，与えられた j の値および偶奇性に対して（空間の中の全角運動量の方向というあまり重要でない点を除いて）2粒子系のただ一つの状態が対応している．このような各状態からは，散乱振幅におけるただ一つの実のパラメーター（位相 δ）が導かれる．これに対して，別のスピンをもつ場合には一般的にいって，同じ全角運動量 J および偶奇性をもついくつかの異なる状態が存在する；これらの状態は，粒子の全スピン S の値およびそれらの相対運動の軌道角運動量 l の値が異なっている．これらの状態の数を n としよう．容易にわかるように，このような状態の各グループからは，散乱振幅の中に $n(n+1)/2$ 個の独立な実のパラメーターが導入される．

実際にこれらの状態に関連して，S-行列は（相反定理のために）$n\times n$ 個の複素数の要素をもつユニタリな対称行列をあらわしている．この行列における独立な量の数は，次のことに注目すれば，容易に計算できる；もしも演算子 $\hat{S}$ を $\hat{S}=\exp(i\hat{R})$ の形にあらわすとユニタリ性の条件は自動的に満足される．ここで $\hat{R}$ は任意のエルミート演算子である（(12.13) 参照）．もしも行列 $\hat{S}$ が対称ならば，行列 $\hat{R}$ も対称となり，$\hat{R}$ はエルミートであるので，それはまた実である．ところが，実の対称行列は $n(n+1)/2$ 個の独立な成分をもっている．

一例をあげると，スピン1/2をもつ2粒子に対して数 $n=2$ である．実際に，与えられた J に対して全部で四つの状態がある：$l=J$ および全スピン $S=0$ または1をもつ二つの状態と $l=J\pm1$, $S=1$ をもつ二つの状態とがある．これらのうち二つは偶（l は偶）であり，二つは奇（l は奇）であることは明らかである．

スピン1/2をもつ粒子の散乱振幅の一般的な形は，2粒子のスピン変数に関する演算子のように，次に述べる不変性の必要条件から容易に書き下すことができる：すなわちそれは時間反転に関して不変なスカラーでなければならな

い．この表式をつくるためには，粒子のスピンの二つの軸性ベクトル $\boldsymbol{s}_1$ および $\boldsymbol{s}_2$，それに二つのふつうの（極性）ベクトル——$\boldsymbol{n}$ および $\boldsymbol{n}'$——を考慮に入れる．この場合，演算子 $\hat{\boldsymbol{s}}_1$ および $\hat{\boldsymbol{s}}_2$ のおのおのは振幅の中に線形に入らなければならない；なぜならば，スピン 1/2 の演算子のあらゆる一般的な関数は線形関数に帰着されるからである．このような条件を満足する演算子のもっとも一般的な形は次の形に書ける：

$$\hat{f}=A+B(\hat{\boldsymbol{s}}_1\boldsymbol{\lambda})(\hat{\boldsymbol{s}}_2\boldsymbol{\lambda})+C(\hat{\boldsymbol{s}}_1\boldsymbol{\mu})(\hat{\boldsymbol{s}}_2\boldsymbol{\mu})+D(\hat{\boldsymbol{s}}_1\boldsymbol{\nu})(\hat{\boldsymbol{s}}_2\boldsymbol{\nu})+E(\hat{\boldsymbol{s}}_1+\hat{\boldsymbol{s}}_2,\boldsymbol{\nu})+F(\hat{\boldsymbol{s}}_1-\hat{\boldsymbol{s}}_2,\boldsymbol{\nu}). \quad (140.12)$$

係数 $A, B, \cdots$ はスカラー量であって，スカラー $\boldsymbol{nn}'$ のみに，つまり散乱角 θ（およびエネルギー）のみに依存してよい；$\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\nu}$ は三つの互いに直交する単位ベクトルであって，それぞれ $\boldsymbol{n}+\boldsymbol{n}'$，$\boldsymbol{n}-\boldsymbol{n}'$ および $[\boldsymbol{nn}']$ の方向を向いている．時間反転の演算は次の変換に対応している：

$$\boldsymbol{s}_1\to-\boldsymbol{s}_1,\quad \boldsymbol{s}_2\to-\boldsymbol{s}_2,\quad \boldsymbol{n}\to-\boldsymbol{n}',\quad \boldsymbol{n}'\to-\boldsymbol{n}.$$

この場合

$$\boldsymbol{\lambda}\to-\boldsymbol{\lambda},\quad \boldsymbol{\mu}\to\boldsymbol{\mu},\quad \boldsymbol{\nu}\to-\boldsymbol{\nu}$$

となり，演算子 (140.12) の不変性は明らかである．

核子（陽子と中性子）相互の散乱の場合には，(140.12) の最後の項は存在しない．このことは，核子間に作用する核力は系の全スピン S の絶対値を保存するということからすでに明らかである；ところが，演算子 $\hat{\boldsymbol{s}}_1-\hat{\boldsymbol{s}}_2$ は演算子 $\hat{\boldsymbol{S}}^2$ と可換でない（(140.12) の中の残りの項は，(117.4) により，全スピン演算子 $\hat{\boldsymbol{S}}$ を用いてあらわすことができて，それゆえ，$\hat{\boldsymbol{S}}^2$ と可換である）．同種核子（pp または nn）の散乱では，散乱角の関数である係数 $A, B, \cdots$ は，2粒子の同等性の帰結としてのある対称関係をも満足する（問題2参照）．

問　　題

1. スピン0をもつ粒子によるスピン 1/2 をもつ粒子の散乱に対して，散乱前の偏極がゼロでないとして，散乱後の偏極を求めよ．

解 式 (140.9) に基づく計算は，$\boldsymbol{\nu}$ 方向を z 軸に選んだ成分について行なうと便利である．その結果，次式を得る：

$$\boldsymbol{P}'=\frac{(|A|^2-|B|^2)\boldsymbol{P}+2|B|^2\boldsymbol{\nu}(\boldsymbol{\nu P})+2\,\mathrm{Im}\,(AB^*)[\boldsymbol{\nu P}]+2\boldsymbol{\nu}\,\mathrm{Re}\,(AB^*)}{|A|^2+|B|^2+2\,\mathrm{Re}\,(AB^*)\boldsymbol{\nu P}}.$$

2. 二つの同種核子の散乱振幅において，角度 θ の関数としての係数が満足する対称条件を求めよ (R. Oehme, 1955).

解 (140.12) の中の項の組み分けをやりなおして，各組が二つの核子系の状態の 1 重項 ($S=0$) または 3 重項 ($S=1$) に対してのみゼロでないようにする：

$$f=a\left(\hat{\boldsymbol{s}}_1\hat{\boldsymbol{s}}_2-\frac{1}{4}\right)+b\left(\hat{\boldsymbol{s}}_1\hat{\boldsymbol{s}}_2+\frac{3}{4}\right)+c\left[\frac{1}{4}+(\hat{\boldsymbol{s}}_1\boldsymbol{\nu})(\hat{\boldsymbol{s}}_2\boldsymbol{\nu})\right]$$
$$+d[(\hat{\boldsymbol{s}}_1\boldsymbol{n})(\hat{\boldsymbol{s}}_2\boldsymbol{n}')+(\hat{\boldsymbol{s}}_1\boldsymbol{n}')(\hat{\boldsymbol{s}}_2\boldsymbol{n})]+e(\hat{\boldsymbol{s}}_1+\hat{\boldsymbol{s}}_2,\boldsymbol{\nu}). \tag{1}$$

式 (117.4) を用いると，容易にわかるように，第 1 項は $S=0$ に対してのみゼロでなく，残りの項は $S=1$ に対してのみゼロでない．粒子の同等性のために，散乱振幅は $S=0$ のとき粒子座標の交換に関して対称でなければならず，$S=1$ のとき反対称でなければならない；この変換は $\theta\to\pi-\theta$ の置換を意味する；あるいはベクトル $\boldsymbol{n}$ および $\boldsymbol{n}'$ のうちの一つの符号を変えることと同等である (§ 137 参照)．これらの条件から次の関係式が得られる：

$$a(\pi-\theta)=a(\theta),\quad b(\pi-\theta)=-b(\theta),\quad c(\pi-\theta)=-c(\theta),$$
$$d(\pi-\theta)=d(\theta),\quad e(\pi-\theta)=e(\theta). \tag{2}$$

アイソ不変性のため，散乱振幅は $T=1$ のアイソスピン状態にある nn 散乱および pp 散乱に対して，また np 散乱に対しても同じである．しかしながら，np 系に対しては $T=0$ の状態もまた可能である；そのため np 散乱振幅は，(1) の中の係数 $a, b, \cdots$ とは異なる係数によって記述され，それらは (2) の対称性をもたない．

§ 141. レッジェ極

§ 128 では，粒子のエネルギーをあらわす複素変数 E の関数として散乱振幅の解析的性質を考察した．角運動量 l はこの場合，実の整数をとるパラメーターの役割を果たした．もしも実のエネルギーに対して，l を連続的な複素変数とみなすならば，方法論的な観点から重要な散乱振幅の性質がさらに解明される[1]．

§ 128 におけると同じように，($r\to\infty$ で) 次の漸近形をもつ動径波動関数を考察しよう：

$$\chi_l=rR_l=A(l,E)\exp\left(-\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}r\right)+B(l,E)\exp\left(\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}r\right). \tag{141.1}$$

これらの関数はシュレーディンガー方程式 (32.8) の解である (ここで l は複素パラメーターとみなされている)．そして これら二つの独立解のどちらを選

1) これらの性質はレッジェ (T. Regge, 1958) によって初めて研究された．

ぶかは条件

$$r\to 0 \text{ で} \qquad R_l \approx \mathrm{const}\cdot r^l \tag{141.2}$$

によって決められる.

このような条件はパラメーター l の許される値に一定の制限を課すことにまず注目しよう. 実際に小さい r での方程式 (32.8) の解の一般形は

$$R_l \approx c_1 r^l + c_2 r^{-l-1}$$

である (§32の終り参照). 第2の解が第1の解の《下地》の上で一義的に区別されて削除されるためには, $r\to 0$ で r^{-l-1} の項が r^l の項より大きくならなければならない. このことから複素数 l に対して, 条件 $\mathrm{Re}\, l > \mathrm{Re}\,(-l-1)$ すなわち

$$\mathrm{Re}\left(l+\frac{1}{2}\right)>0 \tag{141.3}$$

が得られる. 以下ではいつも垂直な直線 $l=-1/2$ の右側にある複素数 l の半平面だけを考察しよう.

パラメーター l に関して解析的な係数をもつ微分方程式の解である波動関数 $R(r;\, l, E)$ は, このパラメーターの解析的関数であり, 半平面 (141.3) において特異点をもたない. このことはとくに漸近形 (141.1) にもあてはまり, したがって関数 $A(l, E)$ および $B(l, E)$ は l に関して特異点をもたない. しかしながらこの場合, ($r\to\infty$ で) (141.1) の両項を保持することは実際に妥当であることが仮定されている. $E>0$ のときはこのことはいつも成り立ち, $E<0$ のときは場 $U(r)$ が条件 (128.6) または (128.13) を満足するならば成り立つ. これらの議論でだいじなことは, 波動関数の (r に関する) 漸近的な振舞いの性質は E のみに依存して, l にはよらないことである. したがって l が複素数であっても漸近形への接近の条件は変わらない.

(141.1) を漸近形 (128.15) と比較すると, 次の形の S-行列の要素がえられる:

$$S(l, E)=\exp\left[2i\delta(l, E)\right]=e^{i\pi l}\frac{A(l, E)}{B(l, E)}. \tag{141.4}$$

これは複素数の l に対して成り立つ (しかしながらこの場合《位相のずれ》 δ はもはや実でない).

実の値の l および $E>0$ に対して, 関数 A および B は関係式 (128.4) によっ

て結ばれている：$A(l, E)=B^*(l, E)$. このことから複素数 l に対して

$$E>0 \text{ のとき } \quad A(l^*, E)=B^*(l, E) \tag{141.5}$$

が導かれる．したがって $S(l, E)$ は**複素ユニタリ性**の条件

$$S^*(l, E)S(l^*, E)=1 \tag{141.6}$$

を満足する．

l の関数としての $A(l, E)$ および $B(l, E)$ には特異点が存在しないために，関数 $S(l, E)$（およびそれとともに部分散乱振幅 $f(l, E)$）は 関数 $B(l, E)$ のゼロ点にしか特異点（極）をもたない．複素数 l の平面における散乱振幅の極は**レッジェ極**と呼ばれる．その位置はもちろん実のパラメーター E の値に依存する．関数

$$l=\alpha_i(E)$$

は極の位置を決定するもので，**レッジェ軌跡**と呼ばれる．E の値が変わると，極は l 平面上を一定の線に沿って移動する（極につけた添字 i は以下では省略する）．

レッジェ軌跡の性質の研究を始めるにあたり，まず最初に $E<0$ に対してすべての $\alpha(E)$ は実関数であることを示そう．このためには方程式

$$\chi''+\left[\frac{2m}{\hbar^2}(E-U(r))-\frac{\alpha(\alpha+1)}{r^2}\right]\chi=0 \tag{141.7}$$

を考察しよう．これは $l=\alpha$ をもつ波動関数によって満たされている．この方程式に χ^* を掛けて，それを r に関して積分すると（第1項は部分積分によって変形して)，次式を得る：

$$-\int_0^\infty|\chi'|^2dr+\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty(E-U)|\chi|^2dr-\alpha(\alpha+1)\int_0^\infty\frac{|\chi|^2}{r^2}dr=0.$$

ここで $B=0$ のとき（これはレッジェ極を定める条件である）波動関数は $r\to\infty$ で指数関数的に減衰し，したがってすべての積分は収束することを考慮した．上の方程式の最初の二つの項は実であり，最後の項の積分も実である．したがって

$$\mathrm{Im}\,\alpha(\alpha+1)=\mathrm{Im}\left(\alpha+\frac{1}{2}\right)^2=2\,\mathrm{Re}\left(\alpha+\frac{1}{2}\right)\mathrm{Im}\,\alpha=0$$

でなければならない．ところがわれわれは (141.3) の半平面上にある極のみを考えているので，確かに $\mathrm{Re}\,(\alpha+1/2)>0$ であり，したがって求めている次の

結果が得られる：

$$E<0\text{ のとき}\quad \mathrm{Im}\,\alpha(E)=0. \tag{141.8}$$

さらに（等式（128.10）を導いたのと同様にして）方程式（141.7）に次の演算をほどこそう．それを E で微分し，得られた式に χ を掛け，最初の式（141.7）に $\partial\chi/\partial E$ を掛ける．その後で一方から他方を引くと次の等式を得る：

$$\left[\chi'\frac{\partial\chi}{\partial E}-\chi\left(\frac{\partial\chi}{\partial E}\right)'\right]'-\frac{2m}{\hbar^2}\chi^2+\frac{\chi^2}{r^2}\frac{d\alpha(\alpha+1)}{dE}=0.$$

これを r について 0 から ∞ まで積分し，このときふたたび $r\to\infty$ で χ がゼロとなることを考慮する．第 1 項の積分はゼロとなるので，次式が得られる：

$$\frac{d\alpha(\alpha+1)}{dE}\int_0^\infty\frac{\chi^2}{r^2}dr=\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty\chi^2dr. \tag{141.9}$$

α が実であることをすでにわれわれは知っているので，波動関数もまた実であり，したがって（141.9）式の二つの積分は明らかに正である．それ故

$$\frac{d}{dE}\alpha(\alpha+1)=2\left(\alpha+\frac{1}{2}\right)\frac{d\alpha}{dE}>0$$

となり，$\alpha+1/2$ が正であるため

$$E<0\text{ のとき}\quad\frac{d\alpha}{dE}>0$$

である．このようにして $E<0$ のとき $\alpha(E)$ は E の増大とともに単調増大する．

関数 $\alpha(E)$ が《物理的な》値（つまり整数 $l=0, 1, 2, \cdots$）をとるような E の負の値は，系の離散的なエネルギー準位に対応している．このようにして束縛状態に対してレッジェ軌跡に依拠した新しい分類の原理ができたことに注目しよう．それは

例としてクーロン引力場における運動に対するレッジェ軌跡を考察しよう．この場合の散乱行列の要素は次のように与えられる[1]：

$$S_l=\frac{\Gamma(l+1-i/k)}{\Gamma(l+1+i/k)} \tag{141.10}$$

（k はクーロン単位であらわしている）．これの極は関数 $\Gamma(l+1-i/k)$ の引数が負の整数またはゼロになる点に存在する．$E<0$ のとき $k=i\sqrt{-2E}$ となるので

1）式（135.11）と比較せよ．ここで（斥力の場合から引力の場合に移るには）k の前にある符号を変えなければならない．

$$\alpha(E) = -n_r - 1 + \frac{1}{\sqrt{-2E}}, \qquad E<0 \tag{141.11}$$

を得る．ここで $n_r=0, 1, 2, \cdots$ はレッジェ軌跡につけた番号である．$\alpha(E)$ を整数 $l=0, 1, 2, \cdots$ に等しく置くと，クーロン場における離散エネルギー準位に対するよく知られたボーアの式

$$E = -\frac{1}{2(n_r+1+l)^2}$$

が得られる．ここで数 n_r は，動径波動関数の節の数を定める動径量子数と一致していることがわかる．レッジェ軌跡の各々（すなわち与えられた n_r の各々）は，軌道角運動量の値の異なる無限個の準位に対応している．

$E>0$ のときの関数 $\alpha(E)$ の性質を論じよう．(141.1) における関数 $A(l, E)$ および $B(l, E)$ は複素変数 E の関数として，実軸の右側半分に切断をもつ平面で定義されていることを思い出そう（§ 128 参照）．このことに対応して，方程式 $B(l, E)=0$ の根である関数 $l=\alpha(E)$ もまたこのような切断をもつ．切断の上端および下端で $\alpha(E)$ は複素共役の値をもつ．この場合上端では $\mathrm{Im}\,\alpha>0$ である．このことの形式的な証明を与える代りに，その起源を明らかにするもっと物理的な説明を行なおう．

複素数の l に対して，遠心エネルギーもまた複素数となり，それにともなって有効ポテンシャル・エネルギー $U_l=U+l(l+1)/2mr^2$ も複素数となる．§ 19 に示した導出をくり返すことにより，(19.6) の代りに次式を得る：

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 + \mathrm{div}\, \boldsymbol{j} = 2|\Psi|^2 \,\mathrm{Im}\, U_l.$$

$l=\alpha$, $\mathrm{Im}\,\alpha>0$ のときに，また $\mathrm{Im}\,U_l>0$ となる．このとき等式の右辺の式は正となり，このことは場の体積の中に新しい粒子が放出されたことを意味する．これに対応して波動関数の漸近形（$B=0$ のとき (141.1) の二つの項のうち最初の項だけを含む）は発散波を表わさなければならない．これは切断の上端に起こる（(128.1) および (128.3) の導出と比較せよ）．

$E>0$ のとき関数 $\alpha(E)$ は複素数であるので，この関数はその場合《物理的な》値 $l=0, 1, 2, \cdots$ をとることができない．この関数はしかしながら（l の複素平面で）これらの値に近い値をとることができる．この場合（与えられた整数の l に対応する）散乱の部分振幅において共鳴が起こることを示そう．

l_0を関数$\alpha(E)$に近い整数であるとしよう．さらにE_0を$\mathrm{Re}\,\alpha(E_0)=l_0$であるような（実の正の）エネルギーの値であるとしよう．するとこの値の近くでは

$$\alpha(E)\approx l_0+i\eta+\beta(E-E_0) \tag{141.12}$$

となる．ここで$\eta=\mathrm{Im}\,\alpha(E_0)$は実の定数である．切断の上端で値$\alpha(E)$を考察しよう．上の議論によりこの場合$\eta>0$となる（そして$\alpha$が$l_0$に近いという仮定により$\eta\ll 1$である）．容易にわかるように，定数$\beta$（つまり$E=E_0$における導関数$d\alpha/dE$）は実の正の量とみなすことができる．実際に，$\alpha(E)$はほとんど実であるので，波動関数$\chi(r;\alpha,E)$もまたほとんど実である．$\eta$に関する高次の微少量を無視すると$\chi$の虚部を無視することができて，関係式(141.9)における積分が正であることからβが正であることが導かれる[1]．

値$l=\alpha(E)$は関数$B(l,E)$のゼロであるので，点α, E_0の近くではこの関数は$\alpha-l$に比例する．したがって(141.12)を考慮すると，次式を得る：

$$B(l_0,E)\approx\mathrm{const}\,[a(E-E_0)+i\eta]. \tag{141.13}$$

しかしこの式はちょうど(134.6)と形が同じであり，そしてE_0はエネルギー，$\Gamma=2\eta/a>0$は準離散準位の幅である．このように（$E>0$のとき）レッジェ軌跡が整数lに近いことは，系の準定常状態に対応している．このことによって，これらの状態に対して，完全定常状態に対するのと同じ分類の原理が生じる．すなわちレッジェ軌跡の各々には，離散および準離散準位のすべての組が対応することができる．

lを複素変数とみなすことにより，（$E>0$のとき）級数(123.11)で与えられ

---

1) これらの積分の構造を解明するためには，波動関数に対して式(141.1)が成り立つ$r\gg a$の漸近領域は（aは場の作用半径），もしもηが小さければ，積分に対して小さい寄与しか与えないことに注目しよう．実際にもしも$l=\alpha(E)$が関数$B(l,E)$のゼロであるならば，((141.5)により）$l=\alpha^*$は関数$A(l,E)$のゼロである．したがって$A(\alpha,E)$（したがって領域$r\gg a$における$\chi(r;\alpha,E)$）は$\eta^{1/2}$の程度の小さい量であることがわかる（(134.11)参照）．積分を評価するさい，（Eに関する）切断の上端で波動関数は因子e^{ikr}を含むことがまた重要である：$\chi(r;\alpha,E)=A(\alpha,E)e^{ikr}$．この端では$E$は$E+i\delta$（ここで$\delta\to+0$）と考えることができる．すると$k$も小さい正の虚部をもち，それによって(141.9)の中の積分の収束性が保証される．領域$r\gg a$からの積分への寄与が小さいことは，物理的には，エネルギーE_0が準定常状態に対応していることと関連している（以下参照）．したがって粒子がこの領域に入るのは，ありそうもない状態の崩壊の結果としてのみである．積分への主な寄与は$r\sim a$の領域から生じ，そこでは波動関数はほとんど実である．

る次の全散乱振幅に対する有用な積分表式を得ることができる：

$$f(\mu)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)[S(l,E)-1]P_l(\mu),\quad \mu=\cos\theta. \tag{141.14}$$

このためにはまず最初に，関数 $P_l(\mu)$ を整数の $l\geqq 0$ に対してのみならず，複素数 l に対しても定義しなければならない．これを行なうには，$P_l(\mu)$ が方程式 (c. 2)

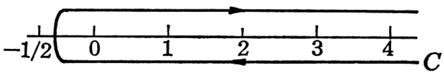
$$(1-\mu^2)P_l''(\mu)-2\mu P_l'(\mu)+l(l+1)P_l(\mu)=0 \tag{141.15}$$

の解で，境界条件 $P_l(1)=1$ をもつことを考えよう．このようにして定義された l の関数としての $P_l(\mu)$ は，この変数の有限の値で特異点をもたない[1]．

容易にわかるように級数 (141.14) は積分

$$f(\mu)=\frac{1}{4k}\int_C\frac{2l+1}{\sin\pi l}[S(l,E)-1]P_l(-\mu)dl \tag{141.16}$$

に等しい．ここで径路 C は，実軸上のすべての点 $l=0,1,2,\cdots$ を（時計回りに）負の方向に向かって迂回し，無限遠で閉じるようにとられる：



この場合関数 $S(l,E)$ のすべての極 $l=\alpha_1,\alpha_2,\cdots$（これらは $E>0$ のとき実軸上にはない）は径路 C の外側に置かれなければならない．

実際に，積分 (141.16) は関数 $1/\sin\pi l$ の極である点 $l=0,1,2,\cdots$ における被積分式の留数の和（に $-2\pi i$ を掛けたもの）であり，そしてこの関数 $1/\sin\pi l$ それ自身の留数は $(-1)^l/\pi$ である．整数 l に対して $P_l(-\mu)=(-1)^lP_l(\mu)$ であることに注目すると，(141.16) は (141.14) に帰着される[2]．

---

1) (141.15) を方程式 (e. 2) と比較することにより，$P_l(\mu)$ を次の超幾何関数で表わすことができる：

$$P_l(\mu)=F\left(-l,\ l+1,\ 1;\ \frac{1-\mu}{2}\right).$$

2) 本節で考察された（非相対論的な枠内での）問題の領域に関するより詳細な記述は，§ 123 の 610 頁の脚注に示した de Alfaro and Regge の本に見出すことができる．

第18章　非弾性衝突の理論

§ 142. 非弾性過程が存在するときの弾性散乱

衝突粒子の内部状態の変化を伴う衝突を**非弾性衝突**と呼ぶ．この変化をここではもっとも広い意味に，とくに粒子の種類自身も変わってもよいと考えよう．たとえば，原子の励起あるいはイオン化でもいいし，また原子核の励起あるいは崩壊その他でもよい．衝突（たとえば原子核反応）が種々の物理的過程を伴ってもよい場合に，それらを種々の反応**チャネル**という．

非弾性チャネルの存在は，弾性散乱の性質にある影響を与えることになる．

種々の反応チャネルが存在する一般の場合には，衝突粒子の系の波動関数の漸近形は，可能な各チャネルに1項ずつが対応するような和であらわされる．これらのなかには，とくに，始めのまま変わらない状態（いわゆる**入射チャネル**）にある粒子を記述する項がある．これは粒子の内部状態の波動関数と，（その重心が静止している座標系で）粒子どうしの相対運動を記述する関数との積になっている．そしてこの後者の関数がここでは興味がある．これをψとおき，その漸近的な形を明らかにしよう．

入射チャネルの波動関数ψは，弾性散乱のように入射平面波と発散球面波から重ね合わされる．これはまた，§123で行なわれたように，収束波と発散波の和の形にあらわすことができる．その違いは，動径関数$R_l(r)$に対する漸近式が，定常波の形をとることができないことにある．定常波は同じ振幅の収束波と発散波の和である．純弾性散乱のときには，これは問題の物理的意味に対応している．しかし非弾性チャネルが存在するときは，発散波の振幅は収束波の振幅よりも小さくならなければならない．したがって，ψの漸近式は公式(123.9)によって与えられる．すなわち

$$\psi=\frac{1}{2ikr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)[(-1)^{l+1}e^{-ikr}+S_le^{ikr}] \qquad (142.1)$$

である．相違点は，いまは S_l は式 (123.10) では定義されずに，絶対値が 1 より小さいある（一般的にいって複素）量であることである．弾性散乱の振幅は，公式 (123.11) により，これらの量を使って

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(S_l-1)P_l(\cos\theta) \tag{142.2}$$

であらわされる．弾性散乱の全断面積 σ_e に対しては，(123.12) の代わりに公式

$$\sigma_e=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)|1-S_l|^2 \tag{142.3}$$

を得る．

非弾性散乱の全断面積，あるいはすべての可能なチャネルの，いわゆる**反応断面積** σ_r はまた，量 S_l を使ってあらわすことができる．このためには次の点に気づけばよい．l のおのおのの値に対して発散波の強度は，収束波の強度に比べて，$|S_l|^2$ の比で弱められる．この減少は非弾性散乱のせいである．したがって，

$$\sigma_r=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-|S_l|^2) \tag{142.4}$$

となることは明らかであり，全断面積は

$$\sigma_t=\sigma_e+\sigma_r=\frac{2\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-\mathrm{Re}\,S_l) \tag{142.5}$$

となる．

角運動量 l をもつ弾性散乱の部分振幅は，(123.15) に従って定義され，

$$f_l=\frac{S_l-1}{2ik} \tag{142.6}$$

である．(142.3) および (142.4) の和の各項は，角運動量 l をもつ粒子の弾性および非弾性散乱の部分断面積である：

$$\begin{aligned}\sigma_e^{(l)}&=\frac{\pi}{k^2}(2l+1)|1-S_l|^2,\\ \sigma_r^{(l)}&=\frac{\pi}{k^2}(2l+1)(1-|S_l|^2),\\ \sigma_t^{(l)}&=\frac{2\pi}{k^2}(2l+1)(1-\mathrm{Re}\,S_l).\end{aligned} \tag{142.7}$$

$S_l=1$ という値は（与えられた l のときに）散乱がまったくないことに対応す

る．$S_l=0$ の場合は，与えられた l をもつ粒子の完全《吸収》に対応する (142.1) 中にこの値の l を持つ部分発散波は存在しない)．このとき

$$\sigma_e^{(l)}=\sigma_r^{(l)}=\frac{\pi}{k^2}(2l+1) \tag{142.8}$$

である．すなわち，弾性および非弾性散乱の断面積は同一になる．非弾性散乱なしに（$|S_l|=1$ のとき）弾性散乱は存在し得るが，その逆は不可能であることも指摘しよう．すなわち非弾性散乱の存在は必ず同時に弾性散乱の存在をもたらすわけである．$\sigma_r^{(l)}$ の値が与えられると，弾性散乱の部分断面積は

$$\sqrt{\sigma_0}-\sqrt{\sigma_0-\sigma_r^{(l)}}\leqq\sqrt{\sigma_e^{(l)}}\leqq\sqrt{\sigma_0}+\sqrt{\sigma_0-\sigma_r^{(l)}} \tag{142.9}$$

の区間の値をとり得る．ここで $\sigma_0=(2l+1)\pi/k^2$ である．

$\theta=0$ のときの $f(\theta)$ の値を (142.2) からとり，(142.5) の式と比べて，関係式

$$\operatorname{Im} f(0)=\frac{k}{4\pi}\sigma_t \tag{142.10}$$

が得られる．これは前に得られた光学定理 (125.9) の一般化である．ここで $f(0)$ は前と同様に角度ゼロの弾性散乱の振幅であり，全断面積 σ_t はまた非弾性部分をもそのなかに含んでいる．

部分振幅 f_l の虚部は，部分断面積 $\sigma_t^{(l)}$ と関係式

$$\operatorname{Im} f_l=\frac{k}{4\pi}\frac{\sigma_t^{(l)}}{2l+1} \tag{142.11}$$

によって結ばれる．この式は (142.6) および (142.7) から直接にでてくる．

波動関数の漸近式中の係数 S_l の絶対値が 1 に等しくないという事実は，複素数 E の関数としての弾性散乱振幅の特異点に関して § 128 で行なった結論を反映するものではない．非弾性過程が存在するときにも，これらの導き方は有効である．しかしながら，振幅の解析的性質はつぎのように変えられる．振幅は左実半軸 ($E<0$) では実数でない．また $E>0$ のときには，切断の上端と下端における振幅値が複素共役量ではない（したがって，実軸に対して対称な上下半平面の点でのすべての振幅の値も，一般には複素共役ではない）．

切断の上端を $E=0$ の点を完全に迂回して下端に移すと，根 $\sqrt{E}$ は符号を変える．すなわち，迂回の結果として（$E>0$ のとき）実の量 k は符号を変える．ここで (142.1) のなかの収束波と発散波が役割を変える．それに対応し

て，新しい係数 S_l の役割は，以前のその値の逆数である $1/S_l$ という量が演ずる（これはけっして S_l^* とは一致しない）．切断の上端下端での振幅 f_l の値は，$f_l(k)$ および $f_l(-k)$ とおくのが自然である（物理的な振幅はもちろんただ $f_l(k)$ だけである！）．(142.6) に従って

$$f_l(k)=\frac{S_l-1}{2ik},\qquad f_l(-k)=-\frac{1/S_l-1}{2ik}$$

を得る．これらの二つの等式から S_l を消去して次の関係式を得る：

$$f_l(k)-f_l(-k)=2ikf_l(k)f_l(-k) \tag{142.12}$$

（非弾性過程がなければ，$f(-k)=f^*(k)$ になり，関係式 (142.12) と (142.11) は互いに一致するはずである）．

(142.12) を

$$\frac{1}{f_l(k)}-\frac{1}{f_l(-k)}=-2ik$$

の形に書きかえると，和 $1/f_l(k)+ik$ は k の偶関数でなければならないことがわかる．この関数を $g_l(k^2)$ とおくと，

$$f_l(k)=\frac{1}{g_l(k^2)-ik} \tag{142.13}$$

となる．しかしながら，偶関数 $g_l(k^2)$ はいまは実数でない．これは (125.15) では実数であった[1]．

粒子束が多数の散乱中心からなる散乱媒質中を通過するとき，それはしだいに弱まっていく．これはその中から，弾性および非弾性衝突のいろいろの過程を行なった粒子が失われていくことと関連している．この減衰は，角度ゼロの弾性散乱の振幅によって完全に決定され，適当な条件が守られるときは（下記参照），次のような便利な形式論的方法で記述され得る[2]．

$f(0,E)$ を媒質の各粒子個々の角度ゼロの散乱振幅としよう．f が粒子間の平均距離 $d\sim(V/N)^{1/3}$ に比べて小さいと仮定する．このときは，これらのお

1）ここに述べられた考察，およびそれとともに関数 g_l の偶関数であることについての結論は，$r\to\infty$ のときに相互作用が十分急速に減衰することを前提にしている．これは E の左半平面で切断がないことを保証し，それにより点 $E=0$ を完全に迂回することを可能にするはずである．

2）以下に述べられるあらわし方は，とくに（数百 MeV の程度のエネルギーをもつ）はやい中性子の原子核による散乱に適用される．この中性子の波長は十分に小さく，これに対して原子核は非均質な巨視的媒体とみなすことができる．

のおのの粒子での散乱を個々に考察することができる．補助的な量として，静止中心のある実効場 U_{eff} を導入しよう．これを使って計算された角度ゼロのボルン散乱振幅が，真の振幅 $f(0, E)$ に等しくなるようにこれを決定しよう（このことは，粒子の真の相互作用を使った $f(0, E)$ の計算にボルン近似が適用できるということを意味しているのではけっしてない！）このようにして，定義に従って（(126.4) 参照），

$$\int U_{\text{eff}} dV = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} f(0, E) \tag{142.14}$$

である．ここで m は散乱粒子の質量である．このようにして定義された場は，振幅 f と同じく複素数である．この作用半径 a と U_{eff} という量とのあいだの関係は，等式 (142.14) の両辺の大きさの見積もりから得られる：

$$a^3 U_{\text{eff}} \sim \frac{\hbar^2}{m} f. \tag{142.15}$$

定義 (142.14) はもちろん一意的ではない．場 U_{eff} が摂動論の適用可能な条件を満足するように，もうひとつの付加的条件を課すことにしよう．それは

$$|U_{\text{eff}}| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{142.16}$$

である（このとき $|f| \ll a$ である）．このような場合に，散乱される粒子束の減衰は，一様な媒質での平面波の伝播として記述することができて，そのなかで粒子は

$$\overline{U}_{\text{eff}} = \frac{N}{V} \int U_{\text{eff}} dV = -\frac{N}{V} \frac{2\pi\hbar^2}{m} f(0, E) \tag{142.17}$$

に等しい一定のポテンシャル・エネルギーをもつことが容易にわかる．これは，全体で N 個の粒子からなる媒質の実効場を，その体積 V について平均することによって得られるものである．もしも始めから，散乱中心をたくさん含んでいるが散乱の効果はまだ小さいような媒質素片一つ一つによる散乱を考察すれば，これは明らかである（このような素片に分割可能なことは条件 (142.16) により保証される）．このような素片を通過する際の粒子束の減少は，角度ゼロの散乱振幅によって決定され，後者は今度はボルン近似を用い，散乱する素片の体積で散乱場を積分することにより決定される．このことは，われわれに興味のある媒質の散乱体としての性質が，その体積で平均された場 (142.

17) により決定されることを意味している．

このようにして，媒質を通過する粒子束は，波動ベクトル

$$k=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-\overline{U_{\mathrm{eff}}})}$$

をもつ平面波 $\sim e^{ikz}$ によって記述することができる．入射粒子の波動ベクトル $k_0=\sqrt{2mE}/\hbar$ を導入し，k を nk_0 の形に書く；ここで

$$n=\sqrt{1-\frac{\overline{U_{\mathrm{eff}}}}{E}}=\sqrt{1+\frac{N}{V}\frac{2\pi\hbar^2}{mE}f(0,E)} \tag{142.18}$$

という量は，通過する粒子束に対して，媒質の**屈折率**の役割を演ずる．一般的にいって，それは複素数である（振幅 f も複素数である!）．そしてその虚部は粒子束の強度の減少を決定する．もしも $E\gg|\overline{U_{\mathrm{eff}}}|$ ならば，当然のことながら (142.18) は

$$\mathrm{Im}\,n=\frac{N}{V}\frac{\pi\hbar^2}{mE}\mathrm{Im}\,f(0,E)=\frac{N}{V}\frac{\sigma_t}{2k}$$

を与える．ここで σ_t は散乱の全断面積である（われわれはここで光学定理 (142.10) を使った）．この式は次の自明の結果に対応する：波の強度は，法則

$$|e^{ikz}|^2\sim\exp\left(-\frac{N}{V}\sigma_t z\right)$$

に従って減衰する．

複素屈折率 (142.18) は吸収の他に，（その実数部が）散乱媒質からの出入りの際の粒子束の屈折の法則をも決定する[1]．

問　　題

中性子が重い原子核により散乱される．このとき中性子の波長は原子核の半径 a に比べて小さいとする ($ka\gg1$)．軌道角運動量 $l<ka\equiv l_0$（すなわち衝突パラメーター $\rho=\hbar l/mv=l/k<a$）をもって入射する中性子はすべて核に吸収されるが，$l>l_0$ のときは核

---

1) 別の気体中に入れられたアルカリ金属原子の高い準位のずれは，公式 (142.17) の応用の興味ある例である．価電子の高励起状態で，電子は原子の中心から平均距離 $\bar{r}$ のところにあり，この距離は原子の残りの部分や外部の中性原子の大きさ a に比べて大きい．この半径 $\bar{r}$ の球の内部にある原子が価電子に対して散乱中心の役割を果たし，エネルギー準位に量 (142.17) だけのずれをもたらすことになる．このとき励起された価電子のド・ブロイ波長もまた a に比べて大きいので，振幅は $f(0,E)\approx-\alpha$ である．ここで α は散乱長である ((132.9) 参照)．こうして上記の効果は準位を一定の量 $2\pi\hbar^2\alpha\nu/m$ だけずらすことになる．ここで m は電子の質量，ν は外部気体の粒子数密度である (E. Fermi, 1934).

とは全く相互作用をしないと仮定する．小さい角度の弾性散乱の断面積を決定せよ．

解　提示された条件の下では，中性子の運動は主として準古典的に行なわれ，弾性散乱はわずかな角度の傾きを与える結果になる．これは黒体球による光のフラウンホーファー回折とまったく類似している．したがって，求める断面積は有名な回折の問題の解によって，ただちに書くことができる[1]：

$$d\sigma_e=\pi a^2\frac{J_1^2(ka\theta)}{\pi\theta^2}do.$$

この結果は一般則(142.3)から得られる．問題の条件に従って，$l<l_0$ のとき $S_l=0$ で，$l>l_0$ のとき $S_l=1$ である．したがって，弾性散乱振幅は

$$f(\theta)=-\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{l_0}(2l+1)P_l(\cos\theta)$$

である．l の大きい項が和のなかで主要な役割を演ずる．したがって，$2l+1$ 代わりに $2l$ と書き，θ の小さいときの $P_l(\cos\theta)$ に対しては近似式(49.6)を使い，和を積分に移して

$$f(\theta)=\frac{i}{k}\int_0^{l_0}lJ_0(\theta l)dl=\frac{i}{k\theta}l_0J_1(\theta l_0)=\frac{ia}{\theta}J_1(ka\theta)$$

となる．これが求めるものである[2]．

弾性散乱の全断面積は

$$\sigma_e=\pi a^2\int_0^\infty\frac{J_1^2(ka\theta)}{\pi\theta^2}2\pi\theta d\theta=\pi a^2$$

である(この積分は急速に収束するので，積分範囲は無限大にまでわたって行なわれる)．与えられた条件((142.8)参照)から，当然のことながら，その大きさは吸収断面積と一致し，単に球の幾何学的断面積と一致する．全断面積は $\sigma_t=2\pi a^2$ である．

§ 143. おそい粒子の非弾性散乱

§132で述べられた小さいエネルギーの際の弾性散乱の極限法則は，非弾性過程が存在する場合にも容易に一般化される．

---

1)　第II巻『場の古典論』§61，問題3参照（黒体球での回折の問題は，不透明なついたてにあけられた円孔による回折の問題と同等である）．散乱断面積は，回折波の強度を入射粒子束の密度で割ることによって得られる．

2)　《黒い》核による速い荷電粒子の回折散乱の問題も同様に考察できる．このとき限界値 l_0 は，クーロン場のなかを古典軌道に沿って運動する核と粒子の最近接距離が核半径に等しくなるという条件により決定する必要がある．$l<l_0$ のときは従前通り $S_l=0$，また $l>l_0$ のときは $S_l=e^{2i\delta_l}$ とおく必要がある．ここで δ_l は（135.11）のクーロン位相である．ア・イ・アヒエーゼル，イ・ヤ・ポメランチュク，《核理論の諸問題》国立技術出版所（А. И. Ахиезер, И. Я. Померанчук, Некоторые вопросы теории ядра, Гостехиздат）1950；§22, J. of. Physics USSR, 9, 471 (1945) 参照．

前と同様に，低エネルギーのときの主要な役割は，$l=0$ をもつ散乱が演ずる．§132で得られた結果に従って，対応する S-行列の要素は

$$S_0=e^{2i\delta_0}\approx 1+2i\delta_0=1-2ik\alpha$$

に等しい．§132で使われた波動関数の性質は，ただ次の点だけが変えられる．それは，無限遠でそれに課される条件（漸近形(142.1)）が，純弾性散乱の場合の実数の定常波の代わりに，今度は複素数であることである．これに関連して定数 $\alpha=-c_2/c_1$ が複素数になることがわかる．このとき絶対値 $|S_0|$ はもはや1に等しくはない．条件 $|S_0|<1$ は，$\alpha=\alpha'+i\alpha''$ の虚部が負でなければならないこと $(\alpha''<0)$ を意味している．

S_0 を(142.7)に代入して，弾性および非弾性散乱の断面積を見いだす：

$$\sigma_e=4\pi|\alpha|^2, \tag{143.1}$$

$$\sigma_r=\frac{4\pi}{k}|\alpha''|. \tag{143.2}$$

このように，弾性散乱の断面積は前と同じく速度にはよらない．だが非弾性過程の断面積は粒子の速度に逆比例する．これはいわゆる **$1/v$ 法則**である(H. A. Bethe, 1935)．したがって，速度が小さくなるとき，非弾性過程の役割は弾性散乱に比べて増大する[1]．

極限法則(143.1)および(143.2)は，もちろん，断面積の k のベキ展開の第1項にすぎない．これら二つの断面積の次の展開項が，(143.1), (143.2)にあらわれる量以外に何ら新しい定数を含まないことは重要である（エフ・エリ・シャピロ Ф. Л. Шапиро, 1958)．この事情は $(l=0)$ の部分散乱振幅の式(142.13) $f_0(k)=1/[g_0(k^2)-ik]$ の中の関数 $g_0(k^2)$ が偶関数であることの結果である．したがって，k が小さいときこの関数は k の偶数ベキで展開され，その $g_0\approx-1/\alpha$ につぐ項は $\sim k^2$ である．この項を無視し，われわれは $f_0(k)$ で展開の2項だけを書くことができる：$f_0(k)\approx-\alpha(1-ik\alpha)$．これに対応して，断面積中にも展開の2番目の項を含めることができる．これに対しては容易に次式を得る：

---

1) 同様にして，ゼロと異なる軌道角運動量に対して，反応の部分断面積の速度依存性を決定することができる．それは $\sigma_r^{(l)}\backsim k^{2l-1}$ に比例することがわかる．弾性散乱の断面積 $\sigma_e^{(l)}$ は従前通り k^{4l} に比例する．すなわち $k\to 0$ のとき，同じ l をもつ $\sigma_r^{(l)}$ よりも急速に減少する．

$$\sigma_e = 4\pi|\alpha|^2(1-2k|\alpha''|), \tag{143.3}$$

$$\sigma_r = \frac{4\pi|\alpha''|}{k}(1-2k|\alpha''|). \tag{143.4}$$

得られた結果は，大きい距離で相互作用が十分急速に減少することを前提としている．われわれは§132で，もしも場 $U(r)$ が r^{-3} よりも急速に減少すれば，弾性散乱振幅が $k\to0$ のときに一定の極限に近づくことを見た．非弾性チャネルが存在するとき，類似の法則 (140.1) が成立するためにも，この条件が要求される[1]．

反応断面積に対する $1/v$ 法則は，次のようなはるかに弱い条件を満足することを要求する；場は r^{-2} よりも急速に減少する必要がある．これはこの法則の次のような直観的な導き方から明らかである．

衝突の際に反応が起こる確率は，《反応帯》($r\sim a$ の領域) に入射する粒子の波動関数の絶対値の自乗に比例する．物理的にはこの主張はつぎのような事実をあらわしている．たとえば，原子核に衝突するおそい中性子は，核内に《浸透》したときにのみ反応を起こすことができる．もしも相互作用が r^{-2} よりも急速に減少すると，r の大きい所から $r\sim a$ までの間で，波動関数の大きさの程度は変わらない．いいかえれば，$k\to0$ のときに比 $|\psi(a)/\psi(\infty)|^2$ は有限の極限に近づく（これはシュレーディンガー方程式中で $U\psi$ の項が $\Delta\psi$ に比べて小さくなることからわかる）．反応断面積は $|\psi|^2$ を粒子の流れの密度で割ることによって得られる．ψ を，流れの密度を1に規格化した平面波の形にとり，$|\psi|^2\sim1/v$ を得る．すなわち求める結果である．

荷電核粒子の衝突の際には，短距離に働く核力とともに，ゆっくりと減少するクーロン場もまた存在する．この場は反応帯の中で入射波の大きさを大きく変えることができる．反応断面積は，($r\to0$ のときの) クーロンおよび自由な波動関数の絶対値の2乗の比に $1/v$ を掛けることによって求められる．この比は公式 (136.10), (136.11) により与えられる．このようにして（クーロン単位で）

$$\sigma_r = \frac{2\pi A}{k^2|e^{\pm2\pi/k}-1|} \tag{143.5}$$

1) k についての展開の2番目の項を考慮する公式 (143.3) は，U が r^{-4} よりも急速に減少することを要求する．

を得る．指数関数の中の $+$ 符号は斥力，$-$ 符号は引力に対応する．係数 A は $1/v$ 法則の定数である．もしも速度がクーロン単位に比べて大きいと ($k\gg1$)，クーロン相互作用は何の役割も演じない．そしてわれわれは $\sigma_r=A/k$ の法則にもどることになる．

もしも速度がクーロン単位に比べて小さいと ($k\ll1$，すなわちふつうの単位で $Z_1Z_2e^2/\hbar v\gg1$ である．ここで Z_1e, Z_2e は衝突粒子の電荷である)，クーロン相互作用は，反応帯の中の波動関数の大きさを決定する上で，重要な役割を演ずる．このときは，引力が働く粒子の衝突に対して

$$\sigma_r=\frac{2\pi A}{k^2} \tag{143.6}$$

となる．そして斥力をおよぼしあう粒子の衝突に対して

$$\sigma_r=\frac{2\pi A}{k^2}e^{-2\pi/k} \tag{143.7}$$

となる．あとの場合には $k\to0$ になると断面積はゼロに近づく．(143.7) と (143.6) の違いである指数因子は，クーロン障壁を通過する確率である．ふつうの単位では $\exp(-2\pi Z_1Z_2e^2/\hbar v)$ の形になる．

極限の法則 (143.6) は全断面積だけでなく，すべての角運動量 l を持つ部分断面積にも成立つことを指摘しよう[1]．これは（われわれが使った公式 (136.10), (136.11) にあらわれる）関数 ψ_k^+ の展開 (136.1) の中で，和のすべての項の中で関数 R_{kl} が極限で同一の k-依存性をもつことからわかる．実際に，$k\to0$ の極限で（引力の場合には）動径関数が式 (36.25) で与えられ中心の近くでは $R_{kl}\sim\sqrt{k}\,r^l$ になる．反応帯中の波動関数の自乗への各角運動量の寄与は $\sim a^{2l}/k$ である．すなわち，小さい因子 $(a/a_c)^{2l}$ ($a_c=\hbar^2/mZ_1Z_2e^2$ は長さのクーロン単位である）で弱められるが，k には同じように依存する．

§ 144. 反応が存在するときの散乱行列

§142, §143 で考察された断面積 σ_r は，散乱のすべての可能な非弾性チャネルの断面積の総和である．ここで，各チャネルを個々に考察することが可能なような，非弾性衝突の一般論をどのようにつくり上げるかを示そう．

---

1) 法則 (143.7) についても同じである．

2粒子の衝突の結果として新たに二つの（同じかあるいは異なる）粒子が生ずると考えよう．（エネルギーが与えられたときの）すべての可能な反応チャネルを数え上げ，これらのチャネルに属する量を対応する添字で区別しよう．

チャネル i は入射チャネルとしよう．このチャネルで（重心系での）衝突粒子の相対運動の波動関数は，われわれが再三書いた入射平面波と弾性散乱の発散波との和である：

$$\psi_i = \exp(ik_i z) + f_{ii}(\theta)\frac{\exp(ik_i r)}{r}. \qquad (144.1)$$

振幅 f_{ii} の2乗はチャネル i への弾性散乱の断面積を与える：

$$d\sigma_{ii} = |f_{ii}|^2 do. \qquad (144.2)$$

他のチャネル（添字 f）では，そこに形成される粒子の相対運動の波動関数は発散波である．以下で明らかにされる原因によって，これらの波は

$$\psi_f = f_{fi}(\theta)\sqrt{\frac{m_f}{m_i}}\frac{\exp(ik_f r)}{r} \qquad (144.3)$$

の形にあらわすと便利である[1]．ここで $\boldsymbol{k}_f$ は（チャネル f での）反応生成物の相対運動の波動ベクトル，θ はそれと z 軸との角，m_i および m_f は始めおよび終わりの2粒子の換算質量である．立体角 do 内に散乱される粒子束は，自乗 $|\psi_f|^2$ に $v_f r^2 do$ を掛けることによって得られる．そして対応する反応断面積は，この粒子束を入射粒子の流れの密度——これは v_i に等しい——で割ることによって得られる．このようにして：

$$d\sigma_{fi} = |f_{fi}|^2\frac{p_f}{p_i}do_f. \qquad (144.4)$$

ここで運動量は $p_i = m_i v_i$，$p_f = m_f v_f$ である．

§125では，収束波を発散波に移す散乱演算子 $\hat{S}$ を導入した．いくつかのチャネルが存在すると，この演算子は異なるチャネル間の遷移に対する行列要素をもっている．チャネルについて《対角形》の要素は弾性散乱に対応し，非対角要素は種々の非弾性過程に対応する．もちろん，これらすべての要素は他の変数については演算子のままである．これらの要素は次のようにして決定され

1）　われわれは再び（170頁脚注参照）始めの状態を添字 i，終りの状態を添字 f であらわそう．散乱振幅では終りの状態の添字は始めの状態の添字の左に書かれる．これは行列要素の添字の配置に対応している．統一するために断面積の記号の添字も同じ順序で配置した．

る.

§125 で行なわれたのと同様に，振幅 f_{ii}，f_{fi} と結びついた演算子 $\hat{f}_{ii}$，$\hat{f}_{fi}$ を導入し，これを公式

$$\hat{S}_{fi}=\delta_{fi}+2i\sqrt{k_ik_f}\hat{f}_{fi} \tag{144.5}$$

によってあらわす.

このような定義では，もちろん，ユニタリ条件を満足すべき S-行列を得ることは容易にわかる．実際に，入射チャネルの波動関数を，§125 であらわしたように，収束波と発散波の和の形に書こう：

$$\begin{aligned}\psi_i&=F(-\boldsymbol{n}')\frac{\exp(-ik_ir)}{r\sqrt{v_i}}-(1+2ik_i\hat{f}_{ii})F(\boldsymbol{n}')\frac{\exp(ik_ir)}{r\sqrt{v_i}}\\&=F(-\boldsymbol{n}')\frac{\exp(-ik_ir)}{r\sqrt{v_i}}-\hat{S}_{ii}F(\boldsymbol{n}')\frac{\exp(ik_ir)}{r\sqrt{v_i}}\end{aligned} \tag{144.6}$$

(ここでは便宜上，(125.3) の式と比べて余分な因子 $v_i^{-1/2}$ が導入された)．このとき，われわれが使う振幅の定義に対して，チャネル f の波動関数は

$$\psi_f=2ik_i\sqrt{\frac{m_f}{m_i}}\hat{f}_{fi}F(\boldsymbol{n}')\frac{\exp(ik_fr)}{r\sqrt{v_i}}=\hat{S}_{fi}F(\boldsymbol{n}')\frac{\exp(ik_fr)}{r\sqrt{v_f}} \tag{144.7}$$

の形に書かれる.

収束波の流れは，すべてのチャネルの発散波の流れの和に等しくなければならない．この要求は，衝突の際に生ずるすべての可能な(弾性および非弾性の)過程の確率の和は1に等しくなければならないという明瞭な条件をあらわしている．球面波の分母に入っている因子 $\sqrt{v}$ のために，速度はその波の中の流れの密度から落ちてしまう．したがって，設定された条件は単に，収束波および発散波全体の規格化が一致するという要求を意味している．したがって，それはとくに，種々のチャネルの番号についての行列と考えられる散乱演算子の，従前通りのユニタリ条件によってあらわされる．演算子 $\hat{f}_{fi}$ に対しては，この条件は (125.7) と類似の等式

$$\hat{f}_{fi}-\hat{f}_{if}^{+}=2i\sum_n k_n\hat{f}_{fn}\hat{f}_{in}^{+} \tag{144.8}$$

によってあらわされる．添字 + は，ここでは，複素共役と (チャネルの番号以外の) 残りのすべての行列添字についての転置を意味する.

S-行列は，軌道角運動量の大きさ l が一定値をもつ状態に関しては対角形で

ある．対応する行列要素を添字 (l) で区別しよう． 演算子 $\hat{f}_{ii}$ および $\hat{f}_{fi}$ を関数 (125.17) に作用させて，散乱の弾性および非弾性過程の振幅が次の形に得られる：

$$f_{ii}=\frac{1}{2ik_i}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(S_{ii}^{(l)}-1)P_l(\cos\theta),$$
$$f_{fi}=\frac{1}{2i\sqrt{k_ik_f}}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)S_{fi}^{(l)}P_l(\cos\theta). \tag{144.9}$$

対応する全断面積は

$$\sigma_{ii}=\frac{\pi}{k_i^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)|1-S_{ii}^{(l)}|^2, \qquad \sigma_{fi}=\frac{\pi}{k_i^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)|S_{fi}|^2 \tag{144.10}$$

である． これらの公式の中のはじめのものは (142.3) と一致する．（入射チャネル i からの）反応の全断面積 σ_r は， すべての $f\neq i$ についての和 $\sigma_r=\sum_f{}' \sigma_{fi}$ になる．S-行列のユニタリ性のために

$$\sum_f{}' |S_{fi}|^2=1-|S_{ii}|^2$$

となって，われわれは σ_r に対する公式 (142.4) にもどることになる．

散乱過程の，時間反転に対する対称性（**相反定理**）は等式

$$\hat{S}_{fi}=\hat{S}_{i^*f^*} \tag{144.11}$$

あるいは同じことだが

$$\hat{f}_{fi}=\hat{f}_{i^*f^*} \tag{144.12}$$

によってあらわされる．ここで i^* および f^* は，粒子の運動量およびスピンの投影の符号が変わっている点が， 状態 i および f と異なる状態である[1]．これらのことを，状態 i および f に対して**時間反転された**という．関係式 (144.11)，(144.12) は， 弾性散乱に関する公式 (125.11)，(125.12) の 一般化である[2]．

等式 (144.12) は反応断面積に対する次の関係式になる：

$$d\sigma_{fi}/p_f^2do_f=d\sigma_{i^*f^*}/p_i^2do_{i^*} \tag{144.13}$$

1） 複合粒子（原子，原子核）に対して《スピン》はここでは，構成粒子のスピンや，内部運動の軌道角運動量から成る，全固有角運動量と考える必要がある．

2） われわれはここで， スピンをもつ粒子の衝突の際に生じ得る因子 −1 には触れない（(140.11) 参照)．この事情は，もちろん，断面積に対する関係式 (141.13) には影響しない．

これは**個別釣合いの原理**そのものである．

§126で示されたように，摂動論が適用可能な場合には，その1次近似で相反定理と並んで，正過程および逆過程，すなわち $i\to f$ および $f\to i$ の振幅のあいだに付加的な関係が成り立つ．この性質は等式 $f_{fi}=f^*_{if}$ によってあらわされるが，（同じ近似では）非弾性過程に対しても成立する．このときの対応する断面積は，等式

$$d\sigma_{fi}/p_f^2 do_f = d\sigma_{if}/p_i^2 do_i \qquad (144.14)$$

によって結びつけられる．

もしも，$\boldsymbol{p}_f$ のすべての方向に積分された積分断面積を，その上にさらに終りの粒子のスピン s_{1f}, s_{2f} のすべての方向について和をとり，はじめの粒子の運動量 $\boldsymbol{p}_i$ およびスピン s_{1f}，s_{2f} のすべての方向について平均したものを考察するならば，遷移 $i\to f$ と $i^*\to f^*$ の違いはなくなる．このような断面積を $\bar{\sigma}_{fi}$ とおく：

$$\bar{\sigma}_{fi}=\frac{1}{4\pi(2s_{1i}+1)(2s_{2i}+1)}\sum_{(m_s)}\int d\sigma_{fi}do_i.$$

和はすべての粒子のスピンの投影について行なわれる．積分の和の記号の前の因子は，始めの粒子に関する量については和をとらないで平均をするためにでてくる．(144.13)を

$$p_i^2 d\sigma_{fi} do_{i^*} = p_f^2 d\sigma_{i^*f^*} do_f$$

の形に書き，上記の操作を行なって，求める関係式

$$g_i p_i^2 \bar{\sigma}_{fi} = g_f p_f^2 \bar{\sigma}_{if} \qquad (144.15)$$

を得る．ここで g_i と g_f は量

$$g_i=(2s_{1i}+1)(2s_{2i}+1), \qquad g_f=(2s_{1f}+1)(2s_{2f}+1) \qquad (144.16)$$

をあらわす．これは始めのスピン対と終りのスピン対の可能な向きの数を与える．この数を状態 i および f の**統計的重み**という．

最後に，振幅 f_{fi} の次のような性質を指摘しよう．前節でわれわれは，（相互作用が大きい距離で十分急速に減少するときは）反応断面積が $p_i\to 0$ のときに $\sigma_{fi}\sim 1/p_i$ の法則に従って変化することを見た．公式(144.4)によると，これは $p_i\to 0$ のとき $f_{fi}\to\mathrm{const}$ を意味する．対称性(144.12)のために，これか

ら$p_f \to 0$のときにf_{fi}が一定の極限値に近づくことが出てくる．われわれは§147でふたたびこの性質に立ちもどるであろう．

§ 145. ブライト＝ウィグナーの公式

§134で，有限だが比較的長い寿命をもつ状態として，準定常状態の概念が導入された．**複合核**[1]の形成の段階を経て進行するそう大きくはないエネルギーの核反応の領域で，われわれはこのような準定常状態の広いカテゴリーを扱うことになる．

この過程の直観的な物理像は次のようにまとめられる．核に入射する粒子は核内核子と相互作用をし，その核と《融合》して複合系をつくる．そこでは粒子によりもち込まれたエネルギーはたくさんの核子のあいだに分配される．共鳴エネルギーは，この複合系の準離散準位に対応する．準定常状態の寿命が(核内核子の運動の《周期》に比べて)大きいわけは，次のことと関係がある．それは，時間の経過の大部分のあいだ，エネルギーはたくさんの粒子に分配され，したがって粒子のおのおのは，残りの粒子の引力に打ち勝って核から飛び出すには不十分なエネルギーしかもたないことになる．粒子が飛び出すのに十分大きいエネルギーが一つの粒子に集中されるのかは，相対的にはひじょうにまれである．この際，複合核の崩壊は，可能な反応チャネルに対応していろいろの方法で起こり得る[2]．

このような衝突の上記の特性から，このなかに非弾性過程が可能であっても，複合核の性質と無関係な弾性散乱振幅のポテンシャル部分には影響しないと主張することができる（§134参照）．非弾性過程は弾性散乱振幅の共鳴部分の大きさだけを変える．同じ理由から，複合核形成の段階を経て起こる非弾性散乱の過程の振幅は，純共鳴型の特性をもっている．このとき，$E=E_0-i\Gamma/2$に対して収束波の係数がゼロになるために生じるすべての振幅の共鳴分母は，前と同じ形（$E-E_0+i\Gamma/2$）のままである．ここでΓは従前通り複合核の（任意の）与えられた準定常状態の全崩壊確率を決定する．

---

1)　《複合核》の考え方はN. ボーアにより提出された（1936）．

2)　競争する過程のなかにはまた，入射粒子の放射捕獲がある．このときは，励起された複合核がγ量子を放出してその基底状態に遷移する．この過程はまた，放射遷移の比較的小さい確率のために，《ゆっくり》している．

これらの考察は，散乱振幅が満足すべきユニタリ条件とあわせて，散乱振幅の形を決定するのに十分である．

計算は対称な形で行なうと便利である．それには複合核のすべての可能な崩壊チャネルに番号をつけるが，与えられた反応に対して，その中のどれが入射チャネルであるかを特定しない（チャネルの番号を示す添字は文字 $a, b, c, \cdots$ とする）．さらに，与えられた準定常状態がもつのと同じ l をもつ散乱の部分振幅を考察しよう[1]．上記に対応して，これらの振幅を

$$f_{ab}^{(l)}=\frac{1}{2ik_a}(e^{2i\delta_a}-1)\delta_{ab}-\frac{1}{2\sqrt{k_ak_b}}e^{i(\delta_a+\delta_b)}\frac{\Gamma M_{ab}}{E-E_0+\frac{1}{2}i\Gamma} \quad (145.1)$$

の形に求めよう（定数 δ_a および M_{ab} につく添字 l は簡単のために落とした）．ここで第1項は $a=b$ のときにのみ存在する．これはチャネル a のポテンシャル弾性散乱振幅である（定数 δ_a は公式（134.12）にあらわれる位相 $\delta_l^{(0)}$ と一致する）．（145.1）の第2項は共鳴過程に対応する．この項の共鳴因子の係数の書き方は，ユニタリ条件の適用の結果を簡単にするように選ばれた（下記参照）．

われわれは軌道角運動量の絶対値，すなわち時間反転で符号を変えない量が与えられた値のときの散乱を考察するのであるから，相反定理（時間反転に対する対称性）は，単に振幅 $f_{ab}^{(l)}$ の添字 a, b についての対称性であらわされる．これから，係数 M_{ab} もまた対称でなければならない（$M_{ab}=M_{ba}$）ことが出てくる．

振幅 $f_{ab}^{(l)}$ に対するユニタリ条件は

$$\mathrm{Im}\, f_{ab}^{(l)}=\sum_c k_c f_{ac}^{(l)} f_{bc}^{(l)*} \quad (145.2)$$

である（(144.8) 参照）．これに式（145.1）を代入し，簡単な計算の後

$$\frac{M_{ab}^*}{E-E_0-\frac{1}{2}i\Gamma}-\frac{M_{ab}}{E-E_0+\frac{1}{2}i\Gamma}=\frac{i\Gamma\sum_c M_{ac}M_{bc}^*}{(E-E_0)^2+\frac{1}{4}\Gamma^2}$$

を得る．任意のエネルギー E のときに，この等式が恒等的に満足されるためには，まず第一に，$M_{ab}=M_{ab}^*$，すなわち M_{ab} という量が実数でなければならな

1）われわれは，はじめはこの過程に参加する粒子のスピンによる複雑な効果を避けることにしよう．

い．ついで，次の関係式を得る：

$$M_{ab}=\sum_c M_{ac}M_{bc}. \tag{145.3}$$

すなわち，係数 M_{ab} の行列はそれ自身の平方と一致しなければならない．

対称実行列 M_{ab} は適当な線形直交変換 $\hat{U}$ によって対角形にすることができる．行列の対角要素（固有値）を $M^{(\alpha)}$ とおき，この変換を

$$\sum_{a,b} U_{\alpha a}U_{\beta b}M_{ab}=M^{(\alpha)}\delta_{\alpha\beta}$$

の形に書こう．ここで変換係数は直交関係

$$\sum_c U_{\alpha c}U_{\beta c}=\delta_{\alpha\beta} \tag{145.4}$$

を満足する．また逆に

$$M_{ab}=\sum_\alpha U_{\alpha a}U_{\alpha b}M^{(\alpha)} \tag{145.5}$$

である．

関係式 (145.3) は，固有値 $M^{(\alpha)}$ に対して，条件 $M^{(\alpha)}=(M^{(\alpha)})^2$ をもたらす．ここからこの固有値はゼロあるいは１だけに等しくなり得るということが出てくる．もしもすべての $M^{(\alpha)}$ のなかで，ただ一つだけがゼロと異なる（$M^{(1)}=1$ としよう）とすれば，(145.5) から

$$M_{ab}=U_{1a}U_{1b} \tag{142.6}$$

となる．すなわち，行列 M_{ab} のすべての要素は，量 $U_{1a}(a=1,2,\cdots)$ の組によってあらわされる．もしも $M^{(\alpha)}$ の値のいくつかがゼロと異なれば，要素 M_{ab} は，互いに直交関係によってのみ結ばれ，その他の点では独立な量 $U_{1a}, U_{2a},\cdots$ の異なる組によってあらわされる項の和の形になる．このような場合は，複合核のいくつかの異なる準定常状態が同一の準離散準位に対応するような偶然の縮退に対応するはずである[1]．これらの興味のない場合を落として，すなわち縮退しない準位を考察すると，われわれは行列要素 M_{ab} が，おのおのがただ一つのチャネル番号だけに依存する量の積になるという結果に到達する．

記号

---

1) これはとくに，すべてが $M^{(\alpha)}=1$ の場合に明瞭に見られる．(145.4)，(145.5) から，このときは $M_{ab}=\delta_{ab}$，すなわち異なるチャネル間の遷移が一般に存在しない．いいかえれば，この場合はいくつかの独立な準離散状態に対応するはずである．そしてそのおのおのが一つのチャネルのなかの弾性散乱の際にあらわれる．

$$|U_{1a}|=\sqrt{\frac{\Gamma_a}{\Gamma}}$$

を導入し，公式 (145.6) を

$$M_{ab}=\pm\frac{\sqrt{\Gamma_a\Gamma_b}}{\Gamma} \tag{145.7}$$

の形に書き直そう (M_{ab} の符号は U_{1a} と U_{1b} の符号に依存し，不定のままである)．等式 $\sum U_{1c}U_{1c}=1$ のために，このようにして導入された量 Γ_a は関係式

$$\sum_a \Gamma_a=\Gamma \tag{145.8}$$

を満足する．これらを異なる反応チャネルの**部分幅**と呼ぶ．公式 (145.1), (145.7), (145.8) は求める散乱振幅の一般形を確立する．

つぎに，チャネルの一つを入射チャネルに定めて，最終的な公式に書きなおそう[1]．このチャネルの部分幅を Γ_e (**弾性幅**) とし，他の反応に対応する幅を $\Gamma_{r_1}, \Gamma_{r_2}, \cdots$ としよう．

弾性散乱の全振幅は

$$f_e(\theta)=f^{(0)}(\theta)-\frac{2l+1}{2k}\frac{\Gamma_e}{E-E_0+\frac{1}{2}i\Gamma}e^{2i\delta_l^{(0)}}P_l(\cos\theta) \tag{145.9}$$

である．ここで $\boldsymbol{k}$ は入射粒子の波動ベクトル，$f^{(0)}$ はポテンシャル散乱の振幅である．この公式は，共鳴項の分子の Γ を小さい量 Γ_e に変えた点が式 (134.12) と異なっている．

すでに示されたように，非弾性散乱振幅は純共鳴型の特性をもっている．微分断面積は

$$d\sigma_{r_a}=\frac{(2l+1)^2}{4k^2}\frac{\Gamma_e\Gamma_{r_a}}{(E-E_0)^2+\frac{1}{4}\Gamma^2}[P_l(\cos\theta)]^2 \tag{145.10}$$

で，全断面積は

$$\sigma_{r_a}=(2l+1)\frac{\pi}{k^2}\frac{\Gamma_e\Gamma_{r_a}}{(E-E_0)^2+\frac{1}{4}\Gamma^2} \tag{145.11}$$

である．すべての可能な非弾性過程の断面積の総和は

---

1) この公式は最初にブライトおよびウィグナーによって求められた (G. Breit, E. Wigner, 1936).

$$\sigma_r=(2l+1)\frac{\pi}{k^2}\frac{\Gamma_e\Gamma_r}{(E-E_0)^2+\frac{1}{4}\Gamma^2} \tag{145.12}$$

である．ここで $\Gamma_r=\Gamma-\Gamma_e$ は準位の全《非弾性幅》である．

共鳴値 $E=E_0$ の周囲のエネルギー領域について積分した反応断面積の値もまた重要である．共鳴から離れると σ_r は急激に消滅するので，$E-E_0$ についての積分は $-\infty$ から $+\infty$ までに拡げることができる．そしてわれわれは

$$\int\sigma_r dE=(2l+1)\frac{2\pi^2}{k^2}\frac{\Gamma_e\Gamma_r}{\Gamma} \tag{145.13}$$

を得る．

（波長が核の大きさに比べて大きい）おそい中性子の散乱のときには，s-散乱だけが重要であり，ポテンシャル散乱の振幅は実定数 $-\alpha$ になる．いまは（134.14）の代わりに

$$f_e=-\alpha-\frac{\Gamma_e}{2k\left(E-E_0+\frac{1}{2}i\Gamma\right)} \tag{145.14}$$

を得る．弾性散乱の全断面積は

$$\sigma_e=4\pi\alpha^2+\frac{\pi}{k^2}\frac{\Gamma_e^2+4\alpha k\Gamma_e(E-E_0)}{(E-E_0)^2+\frac{1}{4}\Gamma^2} \tag{145.15}$$

に等しい．

$4\pi\alpha^2$ の項はポテンシャル散乱の断面積と呼ぶ．共鳴部分にはポテンシャル散乱と共鳴散乱の間の干渉があることがわかる．準位のすぐ近く（$E-E_0\sim\Gamma$）だけでは，振幅 α を無視することができる（$|\alpha k|\ll 1$ を思い起こそう）．そしておそい中性子の弾性散乱に対する公式は

$$\sigma_e=\frac{\pi}{k^2}\frac{\Gamma_e^2}{(E-E_0)^2+\frac{1}{4}\Gamma^2} \tag{145.16}$$

の形になる．弾性および非弾性散乱の全断面積は，このとき

$$\sigma_t=\sigma_e+\sigma_r=\frac{\pi}{k^2}\frac{\Gamma_e\Gamma}{(E-E_0)^2+\frac{1}{4}\Gamma^2} \tag{145.17}$$

になる．

ポテンシャル散乱を無視し得る条件では，断面積 σ_e, σ_{r_a} を

$$\sigma_e = \sigma_t \frac{\Gamma_e}{\Gamma}, \qquad \sigma_{r_a} = \sigma_t \frac{\Gamma_{r_a}}{\Gamma}$$

の形にあらわすことができる．すべての可能な共鳴過程の断面積の和である σ_t という量は，このとき核の複合状態を形成する断面積とみなすことができる．種々の弾性および非弾性過程の断面積は，複合核のあれこれの崩壊の相対確率——これは対応する部分幅と準位の全体の幅との比によって与えられる——を σ_t に掛けることにより求められる．断面積のこのようなあらわし方が可能なことは，散乱振幅の分子の中の係数 M_{ab} の因子分解（因子への分解）の結果として起こるものである．これは2段階で進行する衝突過程の物理像に対応する：すなわち，一定の準定常状態にある複合核の形成と，いくつかのチャネルへのその崩壊とである[1]．

すでに§134で示されたように，考察されている公式の適用可能な領域は，複合核の（角運動量が同じ値をもつ）隣りあう準離散準位のあいだの間隔 D に比べて，差 $|E-E_0|$ が小さいという要求だけによって制限される．しかしながら，そこではまた，これらの公式のこのような形では $E\to 0$ への極限移行はできないことが示された．もしも $E=0$ の値が共鳴領域にあれば，この問題が起こる．この場合には，公式はエネルギー E_0 をそれと関係のある定数 ε_0 に置きかえ，弾性幅 Γ_e を $\gamma_e\sqrt{E}$ に置きかえることにより，この公式を変形する必要がある．非弾性幅 Γ_r は従前通り定数とみなさねばならない（H. A. Bethe, G. Placzek, 1937)[2]．この置きかえの結果，非弾性断面積（145.12）は，$E\to 0$ のとき $1/\sqrt{E}$ のように増大し，おそい粒子の非弾性散乱の一般論と一致する（§143)．

一般の場合に，衝突粒子のスピンを考慮に入れると，非常に膨大な公式を扱うことになる．われわれはもっとも簡単で，かつ重要なおそい中性子の散乱の

1）われわれは，二つの始めの粒子（核＋入射粒子）からふたたび2粒子が生ずる $a+X=b+Y$ の形の反応を考えて，すべての計算を行なってきた．しかしながら，この前提は，得られた結果の物理的な特性から明らかなように，基本的な意味をもたない．全断面積に関する（145.11）の形の公式は，核から一つ以上の粒子が飛び出す反応に対しても成立する．

2）小さいエネルギーのときに可能な非弾性過程（たとえば放射捕獲）に対して，$E=0$ という値はしきい値でないことが重要である．与えられた反応のしきい値——これ以下では一般に反応が不可能である——の近くのエネルギーでは，部分幅 Γ_{r_a} に対して，Γ_e に対して示された置きかえと類似の置きかえが要求されるはずである．

場合に限ろう．このときは角運動量 $l=0$ だけが散乱に参与する．このとき複合核のスピンは，標的核のスピン i と中性子のスピン $s=1/2$ との合成によって得られる．すなわち $j=i\pm1/2$ の値をとれる（$i\neq0$ と仮定しよう．そうでない場合には公式にはなんらの変更も一般には起こらない）．複合核の各準離散準位には j の一定値が対応する．したがって，反応断面積は，（$l=0$ の）式 (145.12) に，（核＋中性子）系が必要な j の値——共鳴準位が存在する値——をもつ確率 $g(j)$ を掛けることにより得られる．

中性子と標的核のスピンが無秩序な向きをとると考えよう．スピン $\boldsymbol{i}$ と $\boldsymbol{s}$ の対の可能な向きは合計 $(2i+1)(2s+1)=2(2i+1)$ である．これらの中で，全角運動量 j の与えられた値には $(2j+1)$ 個の向きが対応する．すべての向きが同等な確率と考えて，j の与えられた値をとる確率は

$$g(j)=\frac{2j+1}{2(2i+1)} \tag{145.18}$$

に等しい．

弾性散乱に対する公式も同様に変更する必要がある．このとき，j の二つの値がポテンシャル散乱に参加することを考慮する必要がある．したがって，（共鳴準位に対応する j の）因子 $g(j)$ を (145.15) の第2項に入れる必要がある．また項 $4\pi\alpha^2$ は，和 $\sum_j g(j)\cdot4\pi\alpha^{(j)2}$ に置きかえられなければならない．

共鳴反応が一定の準定常状態にある複合核の形成の段階を経由して起こる事実は，これらの反応の生成物の角度分布に関して，ある一般的考察を述べることを可能にしている．各準定常状態は，他の特性とともに一定の偶奇性をもっている．したがって，複合核の崩壊の際に形成される粒子系 $(b+Y)$ も同じ偶奇性をもつ．これは，座標の反転に際し，この系の波動関数，したがって反応振幅にはただ ±1 を掛けるだけでよいことを意味している．したがって，振幅の自乗，すなわち断面積はこのとき不変である．（粒子の重心系での）座標の反転は，散乱の方向をきめる極角および方位角に対して，置きかえ $\theta\to\pi-\theta$, $\varphi\to\pi+\varphi$ を行なうことを意味している．したがって，反応生成物の角度分布はこの変換に対して不変性をもっている．とくに，反応に参加するすべての粒子のスピンの方向について平均したあとでは，断面積は散乱角 θ にだけ依存する．この角についての分布は，置きかえ $\theta\to\pi-\theta$ に関して対称でなければなら

ない．すなわち，（重心系での）角度分布は衝突粒子の方向に垂直な平面に関して対称でなければならない[1]．

複合核の準位が密に配列していて，その数がひじょうに大きい結果，種々の散乱過程の断面積のエネルギー依存の詳しい様子は，ひじょうに複雑である．この複雑さは，ある核から別の核へと移った場合の断面積の性質の，何らかの系統的変化の考察をとくに困難にしている．こうした関係で，共鳴構造の詳細は抜きにして，準位間隔に比べて大きいエネルギー区間で平均された断面積の様子を考察することは意味がある．このような考察の際に，われわれはまた，種々の型の非弾性散乱のあいだの相違を認めないで，すべての散乱を，以下に述べられる意味で，ただ《弾性》および《非弾性》に分ける[2]．

ここで行なわれる平均の意味を明らかにするために，われわれはふたたびスピンと関連した複雑さから離れ，$l=0$ の散乱の部分断面積を考察しよう．

公式 (142.7) に従って：

$$\sigma_e=\frac{\pi}{k^2}|S-1|^2,\quad \sigma_r=\frac{\pi}{k^2}(1-|S|^2),\quad \sigma_t=\frac{\pi}{k^2}2(1-\mathrm{Re}\,S). \tag{145.19}$$

弾性および非弾性断面積，それとともに全断面積は，ただ一つの量 S を使ってあらわされる（簡単のため添字 (0) は落とされた）．エネルギー区間で平均すると，S に線形に依存する全断面積は，S の平均値を使って

$$\bar{\sigma}_t=\frac{\pi}{k^2}2(1-\mathrm{Re}\,\bar{S}) \tag{145.20}$$

によってあらわされる（ゆっくり変化する因子 k^{-2} は平均によって影響されない）．平均された扱いで，《弾性》断面積として

$$\bar{\sigma}_e^{opt}=\frac{\pi}{k^2}|\bar{S}-1|^2 \tag{145.21}$$

という量を導入しよう．これは一般には平均値 $\bar{\sigma}_e$ とは一致しない．いいかえると，われわれは，発散波 Se^{ikr}/r の振幅の平均をあらかじめ行なって，弾性散乱を定義することになる．このように定義するとき，波束の弾性散乱はその

1)　スピンのない粒子に対して，反応の微分断面積は単に $[P_l(\cos\theta)]^2$ に比例するはずで，上記の対称性は明らかである．

2)　（核散乱のいわゆる光学模型に移るための）以下に述べる平均の方法はワイスコップ，ポーターおよびフェッシュバッハにより提案された（V.F. Weisskopf, C.E. Porter, H. Feshbach, 1954）．

形を変えない；断面積（145.21）は散乱の《干渉性》の部分に当たるということもできる．これは，弾性散乱のなかから，複合核の形成の段階を経て生ずる部分を除くことを意味している：長時間存在する複合核の生成，およびそれにつづく崩壊では，入射波束の特質はまったく失われる．平均された模型での非弾性断面積を，いまや $\overline{\sigma}_a^{opt}=\overline{\sigma}_t-\overline{\sigma}_e^{opt}$ によって，すなわち

$$\overline{\sigma}_a^{opt}=\frac{\pi}{k^2}(1-|\bar{S}|^2) \tag{145.22}$$

によって定義するのは自然である．このようにして，これはいろいろな非弾性過程だけでなく，中間的な複合核の形成を伴って行なわれる弾性散乱の部分も含んでいる．

容易にわかるように，上に示した議論は，極限の場合に起こる事情を正しく反映しており，したがって適当な内挿的性質をもっている．

低エネルギー領域では，共鳴がよく分離しており（$\Gamma \ll D$），各準位の近くで S は公式

$$S=\left(1-\frac{i\Gamma_e}{E-E_0+\frac{1}{2}i\Gamma}\right)\exp(2i\delta^{(0)})$$

によって与えられる．この式を平均して

$$\bar{S}=\left(1-\frac{\pi\overline{\Gamma}_e}{D}\right)\exp(2i\delta^{(0)}) \tag{145.23}$$

を得る．ここで $\overline{\Gamma}_e$ および D は，（与えられたエネルギー区間に含まれる準位について）平均された弾性幅と準位間の平均距離である．ゆっくり変化する関数 $\delta^{(0)}(E)$ は，平均するとき定数と考えることができる．これから

$$\overline{\sigma}_a^{opt}=\frac{\pi}{k^2}\frac{2\pi\overline{\Gamma}_e}{D} \tag{145.24}$$

となる．ここで小さい項 $\sim(\Gamma/D)$ は落とされた[1]．この式は実際に断面積（145.17）の平均値と一致し，複合核の形成に対応することが示される．

複合核の励起エネルギーが大きくなるに従って，その準位間の距離は小さくなり，崩壊確率（したがって，準位の全幅）は増大し，準位は《重なり合い》始める（ここでは準離散準位自身が意味を失ってしまう）．その結果，関数

1）一つの準位の近くで，他の準位の影響を考慮した結果生ずるような項は，この程度の大きさになるはずである．

$S(E)$ の不規則な変化はならされる．したがって，厳密な関数と平均された関数の差は小さくなり，断面積 (145.22) は (145.19) の σ_r と一致する．これは，エネルギーが高くなると入射チャネルへの複合核の崩壊は，このようなエネルギーで可能な他のたくさんの崩壊の仕方に比べて，なんらの役割も演じないことに対応していることがわかる．したがってこの領域では，複合核を形成して行なわれるすべての過程は非弾性と考えることができる．

このようにして，平均された散乱の扱いで，新たに一つの量 $(\bar{S})$ が定義され，これはエネルギーのなだらかな関数である．いわゆる**光学模型**では，この関数の計算に対して，核の散乱の性質は複素ポテンシャルをもつ力場によって近似される．ポテンシャルに虚部が存在することは，弾性散乱とともに粒子の吸収もまた存在することになる．この吸収の断面積は (145.22) の式で与えられ，平均された扱いでの《非弾性》散乱と同一視される．

§ 146. 反応の際の終状態での相互作用

ある反応の結果として生じた粒子間の相互作用は，そのエネルギー分布および角度分布に大きな影響を示すことがある．当然のことながら，相互作用をする粒子の相対速度が小さい場合には，この影響は特別に顕著なはずである．たとえば，2個あるいはそれ以上の粒子が飛び出すような核反応の際に，われわれはこのような現象を扱うことになる．このときこの効果は，自由核子間に働く核力に基づいている[1]．

$\boldsymbol{p}_0$ を飛び出す核子対の重心の運動量，$\boldsymbol{p}$ をその相対運動の運動量としよう．$p \ll p_0$；したがって相対エネルギー $E=p^2/m$（m は核子の質量）は，重心運動のエネルギー $E_0=p_0^2/4m$ に比べて小さいと仮定しよう．このとき同時に E_0 が，2核子系がもつ（本当のあるいは仮想的）準位のエネルギー ε と比べて大きいと仮定する．いいかえれば，核子自身は《はやい》が，その相対運動だけが《おそい》と仮定される．

反応の確率は形成される粒子が《反応帯》にある；すなわち，互いに核力の作用半径 a の距離にあるときのこれらの粒子の波動関数の絶対値の自乗に比例

1) 以下に述べられる結果は，最初にミグダル (A. Б. Мигдал, 1950) により，ついで独立にワトソン (K. M. Watson, 1952) によって得られた．

する（§143 の 1 次粒子に対する同様な考察と比べよ）．いまここでは，われわれの目的はせんじつめれば，反応の確率が一つの核子対の相対運動の特性にどのように依存するかを決定することにある．したがって，この運動の波動関数 $\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})$ だけを考察すればよい．このとき，一定の区間 d^3p にある相対運動量をもつ核子対が形成される確率は

$$dw = \text{const}\cdot|\psi_{\boldsymbol{p}}(a)|^2 d^3p \tag{146.1}$$

になるからである．

§136 で示されたように，系が散乱されて一定の運動方向をもつ状態へ遷移する確率を見いだすためには，終状態の波動関数としては，（無限遠で）平面波とともに収束球面波のみを含む関数 $\psi_{\boldsymbol{p}}^{(-)}$ を使わなければならない．これらの関数は運動量についての δ–関数で規格化される必要がある．他方，関数 $\psi_{\boldsymbol{p}}^{(-)}$ は（複素共役をとり，$\boldsymbol{p}$ の符号を変えることによって）直接に関数 $\psi_{\boldsymbol{p}}^{(+)}$ から求められる．後者は無限遠で発散球面波を含む；すなわち，2 粒子の相互散乱の問題に対応する．(146.1) に代入するとき，この相違は一般には重要でない．したがって，(146.1) では $\psi_{\boldsymbol{p}}$ を関数 $\psi_{\boldsymbol{p}}^{(+)}$ と考えることができる．このようにして，問題はすでにわれわれが考察ずみの，おそい粒子の共鳴散乱の問題に帰着されてしまう．

$r\sim a$ の領域での関数 $\psi_{\boldsymbol{p}}$ の真の形は未知であるけれども，確率のエネルギー依存性を決定するためには，$r\gtrsim 1/k\gg a$（ここで $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{p}/\hbar$ であり，$ak\ll 1$ と仮定されている）の距離でのこれらの関数を考察し，ついでそれを，大きさの程度については，$r\sim a$ の距離まで延長すれば十分である[1]．このとき，$\psi_{\boldsymbol{p}}$ のなかで主要な寄与は（因子 $1/r$ を含む）球面波が与える．この波は l の種々の値をもつ部分波の集まりで，そのおのおのの振幅は対応する散乱振幅である．自乗 $|\psi_{\boldsymbol{p}}(a)|^2$ を決定するためには，ここでは s–波だけに限っても十分である．なぜかというと，エネルギーが小さいとき $l\neq 0$ をもつ散乱振幅は相対的に小さいからである．このようにして，公式 (133.7) に従って

$$\psi_{\boldsymbol{p}}\sim\frac{1}{\kappa+ik}\frac{e^{ikr}}{r} \tag{146.2}$$

1) このような操作が許されるのは，$r\ll 1/k$ の領域では，関数 $\psi_{\boldsymbol{p}}$ を決定するシュレーディンガー方程式中で E を無視できるからである．したがって，この領域で関数 $\psi_{\boldsymbol{p}}$ の E–依存性は $r\sim 1/k$ の領域の関数と，それを《つなぐこと》によって完全に決定される．

を得る．ここで $\kappa=\sqrt{2m|\varepsilon|}/\hbar$ であり，ε は２核子系の結合（あるいは仮想的）状態のエネルギーである[1]．この式を（146.1）に代入して

$$dw_{p}=\mathrm{const}\cdot\frac{d^3p}{E+|\varepsilon|} \tag{146.3}$$

を得る．

このようなわけで，（２核子の重心系での）運動量の方向についての分布は等方的である．これに対し，相対運動のエネルギーについての分布は，公式

$$dw_{E}=\mathrm{const}\cdot\frac{\sqrt{E}\,dE}{E+|\varepsilon|} \tag{146.4}$$

によって与えられる．われわれは，核子の相互作用があるため，E の小さい領域で E についての分布に極大（$E\sim|\varepsilon|$ のとき）があらわれることを見るだろう[2]．

相対運動量の値が小さいこと（$p\ll p_0$）は，実験室系で両方の核子のあいだの角度 θ が小さいことに対応する．したがって，E についての分布に極大があらわれることは，実験室系で核子の飛び去る方向のあいだの相関で，θ の小さい値の確率が大きくあらわれることに対応する．

$\boldsymbol{p}_1$ と $\boldsymbol{p}_2$ を実験室系の運動量としよう．このとき

$$\boldsymbol{p}_0=\boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{p}_2,\qquad \boldsymbol{p}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{p}_2-\boldsymbol{p}_1)$$

である（二つの同一粒子の換算質量が $m/2$ であることを思い起こそう）．これら二つの等式のベクトル積をつくり，$[\boldsymbol{p}_0\boldsymbol{p}]=[\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_2]$ を得る．$p\ll p_0$ のときはこれから

$$p_0p_\perp=p_1p_2\sin\theta\approx\frac{p_0^2}{4}\theta,$$

あるいは $\theta=4p_\perp/p_0$ を得る．ここで $p_\perp$ はベクトル $\boldsymbol{p}$ の（$\boldsymbol{p}_0$ の方向に対する）

---

1) われわれはここでは，平行および反平行スピンをもつ np 対，あるいは反平行スピンをもつ nn 対を考えている．pp 対の場合にはクーロン斥力のために事情は複雑になる；この場合には，§138 で述べられた理論を基礎にして考察しなければならない．

2) 厳密にいうと，公式（146.3），（146.4）の定数係数もまた（反応生成物の全系の波動関数の残りの部分を通して）E に依存することができる．しかしながら，この依存性は弱い，なぜなら，この係数は E の関数として，与えられた反応で核子対が獲得することができるエネルギーの全区間（$\sim E_0$）の間にようやくめだった変化をするからである．したがって $E\ll E_0$ の領域での分布に対して，公式（146.4）で特徴づけられる強い依存性に比べて上の依存性を無視してよい．

模成分である．また θ は $\boldsymbol{p}_1$ と $\boldsymbol{p}_2$ の方向の間の小さい角である．公式 (146. 3) を

$$dw_p = \mathrm{const}\cdot\frac{2\pi p_\perp dp_\perp dp_\parallel}{\frac{1}{m}(p_\perp^2+p_\parallel^2)+|\varepsilon|}$$

の形に書き直し，$dp_\parallel$ について積分すると，確率の角度 θ についての分布を得る．積分の急速な収束性のために，積分は $-\infty$ から $+\infty$ までの領域に拡げてもよい．そして，最終的に

$$dw_\theta = \mathrm{const}\cdot\frac{\theta d\theta}{\sqrt{\theta^2+\frac{4|\varepsilon|}{E_0}}} \tag{146.5}$$

を得る．立体角要素 $do\approx 2\pi\theta d\theta$ に対する角度分布は，$\theta\sim\sqrt{|\varepsilon|/E_0}$ に極大をもっている．

§ 147. 反応のしきいの近くの断面積の振舞い

もしも反応生成物の内部エネルギーの和が，始めの粒子のエネルギーよりも大きければ，反応は**しきい**をもつ．その反応は，衝突粒子の（重心系での）運動エネルギーが一定の《しきい》値 E_{thre} を越えるときにのみ起こることができる．そのしきいの近くでの反応断面積のエネルギー依存性の特質を考察しよう．ここで，反応の結果新たに合計 2 個の粒子が形成されるものと考えよう ($A+B=A'+B'$ の型の反応)．

しきいの近くでは，形成される粒子の相対速度 v' は小さい．このような反応は，衝突粒子の速度が小さいような反応の逆反応である．したがって，この断面積の v' への依存性は，個別釣合いの原理 (144. 13) を使って，v' が入射チャネルの速度であるような反応の既知のエネルギー依存性（§ 143）に従って容易に見いだすことができるはずである．このようにして，粒子 A' と B' との間にクーロン相互作用がない広いカテゴリーの反応（たとえばおそい中性子の生成を伴う核反応はこのようなものである）では，反応断面積が $v'^2(1/v')$ に比例すること，すなわち

$$\sigma_r \propto v' \tag{147.1}$$

であることがわかる[1]．これによりわれわれは，断面積の衝突粒子エネルギーへの依存性を見いだすことができる．すなわち．速度 v' およびそれとともに反応断面積は，差 $E-E_{\text{thre}}$ の平方根に比例する：

$$\sigma_r = A\sqrt{E-E_{\text{thre}}}. \tag{147.2}$$

異なるチャネルごとの散乱振幅は互いにユニタリ性の関係式によって結びつけられる．この結びつきがあるために，新しいチャネルを開くことは，弾性散乱も含めて他の過程の断面積のエネルギー依存性にある特異性があらわれる結果となる (E. Wigner, 1948, ア・イ・バージ A. И. Базь, 1957, G. Breit, 1957)．この現象の原因と特性を明らかにするために，反応のしきい以下で，弾性散乱だけが可能な場合を考察しよう．

しきいの近くでは，粒子 A' および B' は軌道角運動量 $l=0$ をもつ状態につくられる（もちろんこれには法則 (147.2) が対応する)．もしも反応に参加する粒子がスピンをもたなければ，軌道角運動量は保存される．したがって，粒子系 $A+B$ もまた s 状態にある．(142.7) に従って，$l=0$ に対する反応の部分断面積は，対応する弾性散乱の S-行列の要素と，公式

$$\sigma_r^{(0)} = \frac{\pi}{k^2}(1-|S_0|^2) \tag{147.3}$$

によって結ばれる．ここで $\boldsymbol{k}$ は衝突粒子の波動ベクトルである．(147.2) と (147.3) を等しいとして，反応のしきいより上でかつその近くでは，$\sqrt{E-E_{\text{thre}}}$ の程度の大きさの精度で，絶対値 $|S_0|$ は

$$|S_0| = 1-\frac{k_{\text{thre}}^2}{2\pi}A\sqrt{E-E_{\text{thre}}}, \quad E>E_{\text{thre}} \tag{147.4}$$

に等しい．ここで $k_{\text{thre}}=\sqrt{2mE_{\text{thre}}}/\hbar$ である（m は粒子 A と B との換算質量である)．しきいの下の領域では弾性散乱だけが可能である．したがって

$$|S_0| = 1, \quad E<E_{\text{thre}} \tag{147.5}$$

である．

散乱振幅およびそれとともに S_0 は，エネルギーの全変域にわたって解析関数でなければならない．しきいの上下で (147.4) および (147.5) の値をとるような関数は，同一の精度で公式

---

1) §144 の末尾で注意したとおり，$p_f\to 0$ のときに振幅 f_{fi} が近づく極限が一定であることは，ちょうど断面積 (144.4) が p_f に比例する結果に対応する．

$$S_0=e^{2i\delta_0}\left(1-\frac{k_{\mathrm{thre}}^2}{2\pi}A\sqrt{E-E_{\mathrm{thre}}}\right) \qquad (147.6)$$

によって与えられる．ここでδ_0は定数である（$E<E_{\mathrm{thre}}$のとき平方根$\sqrt{E-E_{\mathrm{thre}}}$は虚数で，括弧の中の式の絶対値と 1 との差は，より高次の微少量にすぎない）．

ところがすべての $l\neq 0$ に対して非弾性散乱はない．したがって

$$S_l=e^{2i\delta_l}, \quad l\neq 0 \qquad (147.7)$$

である．このときしきいの近くの領域では，位相 δ_l は $E=E_{\mathrm{thre}}$ の時の値に等しく置かなければならない[1]．

得られた値 S_l を公式 (142.2) に代入して，反応のしきいの近くの散乱振幅に対して次のような式を得る：

$$f(\theta,E)=f_{\mathrm{thre}}(\theta)-\frac{k_{\mathrm{thre}}}{4\pi i}A\sqrt{E-E_{\mathrm{thre}}}\,e^{2i\delta_0}. \qquad (147.8)$$

ここで $f_{\mathrm{thre}}(\theta)$ は $E=E_{\mathrm{thre}}$ のとき散乱振幅である．これから散乱の微分断面積は

$E>E_{\mathrm{thre}}$ のとき，

$$\frac{d\sigma}{do}=|f_{\mathrm{thre}}(\theta)|^2+\frac{k_{\mathrm{thre}}}{2\pi}A\sqrt{E-E_{\mathrm{thre}}}\,\mathrm{Im}\,\{f_{\mathrm{thre}}(\theta)e^{-2i\delta_0}\}$$

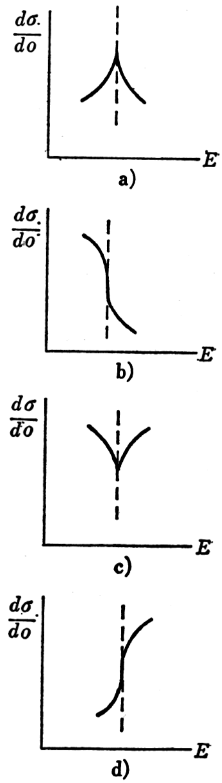
$E<E_{\mathrm{thre}}$ のとき，

$$\frac{d\sigma}{do}=|f_{\mathrm{thre}}(\theta)|^2-\frac{k_{\mathrm{thre}}}{2\pi}A\sqrt{E_{\mathrm{thre}}-E}\,\mathrm{Re}\,\{f_{\mathrm{thre}}(\theta)e^{-2i\delta_0}\}$$

$f_{\mathrm{thre}}=|f_{\mathrm{thre}}|e^{i\alpha(\theta)}$ の形にあらわして，最終的に次の散乱の微分断面積を得る：

$$\frac{d\sigma}{do}=|f_{\mathrm{thre}}(\theta)|^2-\frac{k_{\mathrm{thre}}}{2\pi}A|f_{\mathrm{thre}}(\theta)|\sqrt{|E-E_{\mathrm{thre}}|}$$
$$\times\begin{cases}\sin(2\delta_0-\alpha), & E>E_{\mathrm{thre}},\\ \cos(2\delta_0-\alpha), & E<E_{\mathrm{thre}}.\end{cases} \qquad (147.9)$$

角度 $2\delta_0-\alpha$ が第 1，第 2，第 3，第 4 象限のどれに存在するかに依存して，この公式によって記述される断面積のエネルギー依存性は第50図 a), b), c) あるいは d) に描かれる形になる．すべての場合，共通な垂直方向の接



第 50 図

1) 関数 $\delta_l(E)$ は $E>E_{\mathrm{thre}}$ のときにも $E<E_{\mathrm{thre}}$ のときにも実数であるから，これは差 $E-E_{\mathrm{thre}}$ の整数ベキに展開される．

線の両側にある二つの枝をもっている.

(147.9) を do について積分すると，第2項の積分の中では，振幅 f_{thre} の等方的な，すなわち弾性 s-散乱の振幅平行な部分 $(e^{2i\delta_0}-1)/2ik_{\text{thre}}$ だけがゼロでない寄与を与える．結果として，しきいの近くの弾性散乱の全断面積に対して

$$\sigma=\sigma_{\text{thre}}-2A\sqrt{|E-E_{\text{thre}}|}\begin{cases}\sin^2\delta_0 & E>E_{\text{thre}}\ \text{のとき},\\ \sin\delta_0\cos\delta_0 & E<E_{\text{thre}}\ \text{のとき}\end{cases} \tag{147.10}$$

を得る．この依存性は $\sin\delta_0\cos\delta_0$ の正あるいは負の符号に対応して，第50図の a あるいは b の形になる.

このようにして，反応のしきいの存在は，弾性散乱の断面積のエネルギー依存性に特徴のある特異性があらわれる結果をもたらす．もちろん，粒子にスピンが存在すると定量的な式は変わるが，現象の一般的特質はそのままである[1]. もしもしきいより下で弾性散乱とともに他の反応も可能であるならば，その断面積には同様な特異性があらわれる．これらの断面積すべては，$E=E_{\text{thre}}$ のときに特異性をもち，その近くでは，平方根 $\sqrt{|E-E_{\text{thre}}|}$ の線形関数であって，しきいの上と下で異なる傾斜をもっている.

正の荷電粒子が飛び出す核反応では，反応生成物（粒子 A' および B'）の間にクーロン斥力が働く場合を，われわれは扱うことになる．この場合には，$v'\to 0$（すなわち $E\to E_{\text{thre}}$）のとき，反応断面積は，そのすべてエネルギーに関する微係数とともに，指数関数的にゼロに近づく．そして他の過程の断面積には何らの特異性も起こらない.

最後に二つの正負の電荷をもつおそい粒子——その間にはクーロン引力が働く——の生成を伴う反応を考察しよう．このような反応の断面積は，引力を及ぼしあう二つのおそい粒子の逆の反応の断面積 (143.6) と，個別釣合いの原理によって結ばれている．このようにして，$v'\to 0$ のとき断面積が定数の極限に近づくことがわかる：

$$v'\to 0\ \text{のとき}\qquad \sigma_r=\text{const.} \tag{147.11}$$

すなわち，しきいを通過するとき，突然有限の断面積をもって反応があらわれるのである.

---

1)　スピンがゼロと異なるとき，粒子系 $A'+B'$ は s-状態でもゼロと異なる全角運動量を持ち得る．その関係で系 $A+B$ は別の軌道状態が可能になる.

このような反応のしきいの近くで弾性散乱の断面積がもっている特異な性質を明らかにしよう(ア・イ・バージA. И. Базь, 1959). しかしながら，われわれがさきに電荷のない粒子の場合に使った簡単なような方法を用いて，しきいの上の既知の法則(147.11)に基づいて直接にこれを行なうことはできない．いまはその場合に比べて，次のことのため事情が複雑になっている．それは，しきい近辺の領域で（$E<E_{\rm thre}$ のとき）粒子系 $A'+B'$ はクーロン引力場中の離散準位に対応する結合状態をもつことである．エネルギーの観点からは，この状態は粒子 A と B の衝突の際につくられるが，弾性散乱も可能なことから準定常状態でのみ可能である．しかしながら，その状態の存在は（しきいの下の）弾性散乱に，ブライド＝ウィグナー共鳴に似た共鳴効果があらわれる結果になる．

上の問題を解くために，衝突過程を記述する波動関数の構造を考察しよう．二つのチャネルの存在に対応して，相互作用をする粒子の系のシュレーディンガー方程式は，全位相空間で有界な二つの独立解をもっている．これら二つの任意に選んだ（そして任意に規格化された）解を ψ_1 および ψ_2 としよう．これらの関数から，チャネルのどちらかが入射チャネルになる場合の散乱を記述する1次結合をつくることができる．粒子対 A, B および A', B' に対応するチャネルを a および b とし，和 $\psi=\alpha_1\psi_1+\alpha_2\psi_2$ が入射チャネル a に対応するとしよう．これは粒子 A と B の弾性散乱，および反応 $A+B\to A'+B'$ を記述する．反応のしきいの近くで，係数 α_1 および α_2 は小さい運動量 k_b に大きく依存する．それにもかかわらず，任意に選ばれた関数 ψ_1, ψ_2 自身は $k_b=0$ のときになんらの特異性ももたない．

遠方で波動関数 ψ は，それぞれチャネル a および b での粒子対の運動に対応する2項の和になる．これらのおのおのは粒子の《内部》関数とその相対運動の波動関数の積である[1]．チャネル a では後者は，$R_a^- - S_{aa}R_a^+$，そしてチャネル b では $-S_{ab}R_b^+$ である．ここで R^+, R^- は対応するチャネルでの発散波および収束波である．短距離に働く力の作用半径に比べて大きく，$1/k_b$ に比べて小さい距離 r_0 では，これらの関数（およびその微係数）は《反応帯》のなかの

---

1) 法則 (147.11) は，全断面積に対してのみならず種々の角運動量 l をもつ部分断面積に対しても成立する (§ 143 末尾参照)．したがって，以下で考察される特異性は散乱の部分断面積すべてに成り立つ．この性質は，以下でわれわれが考察する $l=0$ の場合には完全に明らかにされる．簡単のために，対応する部分振幅の添字0は落とされた．

波動関数により計算された値と《つながる》必要がある．これらの条件は

$$\alpha_1 a_1+\alpha_2 a_2=(R_a^- - S_{aa}R_a^+)|_{r_0}, \quad \alpha_1 b_1+\alpha_2 b_2=-S_{ab}R_b^+|_{r_0},$$
$$\alpha_1 a_1'+\alpha_2 a_2'=(R_a^- - S_{aa}R_a^+)'|_{r_0}, \quad \alpha_1 b_1'+\alpha_2 b_2'=-S_{ab}R_b^{+\prime}|_{r_0}$$

の形の等式によってあらわされる．ここで $a_1, a_1', b_1, b_1', \cdots$ は波動関数 ψ_1 および ψ_2 を使って計算される量である．上で述べたように，しきいの近くでは，これらの量は k_b に依存しない定数とみなすことができる．上に書いた等式の1番目の対と2番目の対とを項ごとに割り算をすると，二つの未知数（α_1/α_2 および S_{aa}）に対する二つの連立1次方程式を得る．ここでこれらの方程式の係数中に k_b に《臨界的に》依存する唯一の量，すなわちチャネル b の発散波の対数微分があらわれる．この量を

$$\lambda=(1/2\pi)(rR_b^+)'/rR_b^+|_{r=r_0}$$

で定義しよう．実際にはこれらの方程式を解く必要はない．われわれに興味のある（弾性散乱振幅を決定する）量 S_{aa} はこのとき λ の分数線形関数であることがわかる．しきいの下では λ は実数である．なぜかというと，実のシュレーディンガー方程式の，無限遠での実の条件の（$e^{-\kappa_b r}$ のような減少，ここで $\kappa_b=\sqrt{2m_b(E_{\text{thre}}-E)}/\hbar$）ときの解である波動関数 R_b^+ は実であるからである．同時にしきいの下では，$|S_{aa}|=1$ でなければならない．これから，分数線形関数 $S_{aa}(\lambda)$ は

$$S_{aa}=(1+\beta\lambda)e^{2i\eta}/(1+\beta^*\lambda) \qquad (147.12)$$

の形にならねばならない．ここで η は実数の，β は複素数の定数である．

運動量 k_b の関数として量 λ を決定しよう．粒子 A と B の間にはクーロン引力が働くので，rR_b^+ は無限遠で漸近的に $e^{ik_b r}$ に比例するクーロン波動関数で与えられる．斥力のクーロン場では，この関数は (138.4) と (138.7) の G_0 と F_0 を使った G_0+iF_0 という和で与えられる．引力場への移行は，同時に k と r の符号を変えることによって実現される[1]．これらの交換を行ない，対数微分（§138参照）を行なって[2]

1）以下われわれはクーロン単位を使う．k および r の符号の変化は形式的には，長さのクーロン単位の符号の変化に対応する．

2）波括弧内では簡単のために，k_b に依存しない実定数 $(-\ln 2r_0-2C)$ を落した．これは (147.12) 中の複素量 β および実の量 η の本質的でない定義の変更をもたらすだけである．

$$\lambda=\frac{i}{1-\exp(-2\pi/k_b)}-\frac{1}{\pi}\left\{\log k_b+\frac{1}{2}\left[\psi\left(\frac{i}{k_b}\right)+\psi\left(-\frac{i}{k_b}\right)\right]\right\} \quad (147.13)$$

を得る．ここで k_b は実の量と仮定される．それゆえ，この公式はしきいより高い領域で成立する．$k_b\to0$ では (147.13) の第1項は i になり，第2項はゼロに近づく (689ページの脚注参照)．このようにして，しきいより上では

$$\lambda=i, \quad E>E_{\mathrm{thre}} \quad (147.14)$$

となる．しきいの下の領域への移行は，k を $i\kappa$ に置きかえることによって実現される．この後 (147.13) から $\kappa\to0$ として次式が得られる[1]：

$$\lambda=-\cot\frac{\pi}{\kappa_b}, \quad E<E_{\mathrm{thre}}. \quad (147.15)$$

上に得られた公式が考えている問題の解である．弾性散乱の断面積は

$$\sigma_e=\frac{\pi}{k_a^2}|S_{aa}-1|^2$$

である．しきいの上では

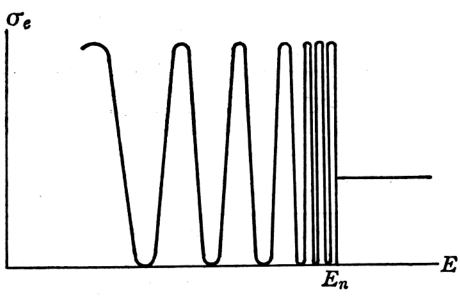
$$S_{aa}=\frac{1+i\beta}{1+i\beta^*}e^{2i\eta}, \quad E>E_{\mathrm{thre}} \quad (147.16)$$

になる．反応断面積と同様に散乱断面積もこの領域では定数であることがわかる．条件 $|S_{aa}|\leqq1$ は，$\mathrm{Im}\,\beta>0$ でなければならないことを意味する．

しきいの下では

$$S_{aa}=e^{2i\eta}\frac{\beta-\tan(\pi/\kappa_b)}{\beta^*-\tan(\pi/\kappa_b)} \quad (147.17)$$

となる．この式は $E=E_{\mathrm{thre}}$ の点に向かって濃密になっている無数の共鳴をもっている．共鳴エネルギーは方程式 $S_{aa}=-1$，すなわち



第 51 図

---

1) (147.13) の第1項は $-\frac{1}{2}\cot\frac{\pi}{\kappa_b}+\frac{i}{2}$ を与え，波括弧の中の式は $\frac{\pi}{2}\cot\frac{\pi}{\kappa_b}+\frac{i\pi}{2}$ になる．このとき，$\psi(x)-\psi(-x)=-\pi\cot\pi x-1/x$ (これは既知の関係式 $\Gamma(x)\Gamma(-x)=-\pi/x\sin\pi x$ を対数微分することにより求めることができる) および $x\to\infty$ の極限の式 $\psi(x)\approx\log x-\frac{1}{2x}$ を使った．

$$\mathrm{Re}\, e^{i\eta}\left(\beta-\tan\frac{\pi}{\kappa_b}\right)=0$$

の根である．これらは短距離力の存在のために，純粋なクーロン準位（方程式 $\tan(\pi/\kappa_b)=0$ の根）にくらべて少しずれている．エネルギー E がしきい値に近づくにつれて，弾性散乱の断面積は第51図に図示されているように，ゼロと $4\pi/k_a^2$ の間を振動する．しきいの下の全領域の中に共鳴構造があらわれているが，この領域の幅は第1クーロン準位のエネルギーの大きさで決定される[1]．

§ 148. はやい電子と原子の非弾性衝突

はやい電子と原子との非弾性衝突は，§139で弾性散乱に対して行なわれたのと同様に，ボルン近似を使って考察することができる[2]．ボルン近似の適用可能の条件は，前の通りに，入射電子の速度が原子内電子の速度に比べて大きくなることを要求する．衝突の際のエネルギー損失に関しては，それは任意の値をとり得る．もしも電子がそのエネルギーの大部分を失えば，原子内電子の一つにエネルギーを与えて原子の電離をもたらすことになる．しかしわれわれはいつも，二つの電子の中で衝突後に大きい速度をもつものを散乱されたものと考えることができる．このようにして，入射電子が大きい速度をもつときには，散乱される電子の速度もまた大きいと考えることができる．

電子と原子の衝突の際には，重心が静止している座標系は，すでに示したように原子が静止している系と一致すると考えてよい．以下われわれは，この後者の系について語ることにしよう．

非弾性衝突は原子の内部状態の変化を伴う．原子は正常の状態から，離散あるいは連続スペクトルの励起状態に移る．後の場合にはこれを原子の電離とい

1)　しきいの近くの反応についてのもう一つの興味ある例に触れよう．それは，電子のエネルギーが原子の第1電離エネルギーより多少大きいような，電子による原子の電離である．この条件では，衝突過程は準古典的と考えられ，終状態の三つの荷電粒子の存在により問題は非常に複雑になる．この困難な問題の一般解はワニエにより与えられた（G.H. Wannier, Phy. Rev. **90**, 817 (1953)）．中性原子の電離の確率は

$$(E-I)^{\alpha}$$

になる．ここで

$$\alpha=\frac{1}{4}\left(\sqrt{\frac{91}{3}}-1\right)=1.13$$

である．ここで $E-I$ は電離のしきい以上の電子の余分なエネルギーである．

2)　§148–§150に述べられる結果の大部分は，ベーテによって得られた（H. A. Bethe, 1930）．

う．一般式を導く際に，これら二つの場合をいっしょに考察することができる．

(§ 126 と同様に) 連続スペクトルの状態間の遷移確率に対する一般式から出発し，それを入射電子と原子とからなる系に適用しよう．衝突前後の入射電子の運動量を $\boldsymbol{p}$ と $\boldsymbol{p}'$，衝突前後の原子のエネルギーを E_0, E_n としよう．遷移確率に対して，(126.9) のかわりに次式を得る：

$$dw_n = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle n, \boldsymbol{p}'|U|0, \boldsymbol{p}\rangle|^2 \delta\left(\frac{p'^2-p^2}{2m}+E_n-E_0\right)\frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}. \qquad (148.1)$$

ここで行列要素は，入射電子と原子の相互作用のエネルギー

$$U = \frac{Ze^2}{r} - \sum_{a=1}^{Z}\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_a|}$$

から作られる ($\boldsymbol{r}$ は入射電子の，$\boldsymbol{r}_a$ は原子内電子の動径ベクトルである．座標原点は原子核を選び，m は電子の質量である)．

電子の波動関数 $\psi_{\boldsymbol{p}}, \psi_{\boldsymbol{p}'}$ は，前出の公式 (126.10)，(126.11) により定義される．このとき dw は衝突の断面積 $d\sigma$ である．始状態および終状態の原子の波動関数を ψ_0, ψ_n とおこう．もしも原子の終状態が離散スペクトルに対応すれば，ψ_n(ψ_0 も同様) はふつうのように 1 で規格化される．原子が連続スペクトルの状態に移れば，波動関数はこれらの状態を定義するパラメーター ν についての δ-関数で規格化される) これらのパラメーターは，たとえば原子のエネルギーであってもよいし，イオン化のときに原子から飛び出す電子の運動量の成分であってもよい)．結果として得られた断面積は，パラメーターの値が ν と $\nu+d\nu$ の間の区間にある連続スペクトルの状態へ原子が遷移する確率を決定する．

(148.1) の中の絶対値 p' についての積分は

$$d\sigma_n = \frac{mp'}{4\pi^2\hbar^4}|\langle n\boldsymbol{p}'|U|0\boldsymbol{p}\rangle|^2 do'$$

を与える．ここで p' はエネルギー保存則

$$\frac{p^2-p'^2}{2m} = E_n - E_0 \qquad (148.2)$$

から決定される．行列要素に，(126.10)，(126.11) の電子の波動関数を代入すると

$$d\sigma_n=\frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\frac{p'}{p}\left|\iint Ue^{-i\boldsymbol{qr}}\psi_n^*\psi_0 d\tau dV\right|^2 do \qquad (148.3)$$

を得る（$d\tau=dV_1dV_2\cdots dV_Z$ は原子の Z 個の電子の位相空間における体積要素で，do の上のダッシュは落としてある）[1]．$n=0$ と $p=p'$ のとき，(148.3) は弾性散乱の断面積に対する式になる．

関数 ψ_n と ψ_0 の直交性のために，U の中の核との相互作用 Ze^2/r を含む項は，τ についての積分のときに消える．このようにして，非弾性散乱に対して

$$d\sigma_n=\frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\frac{p'}{p}\sum_a\left|\iint\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_a|}e^{-i\boldsymbol{qr}}\psi_n^*\psi_0 d\tau dV\right|^2 do \qquad (148.4)$$

となる．

V についての積分は，§139で行なわれたのと同様に行なわれる．積分

$$\varphi_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{r}_a)=\int\frac{e^{-i\boldsymbol{qr}}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_a|}dV$$

は空間に密度 $\rho=\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_a)$ で分布している電荷が点 $\boldsymbol{r}$ につくるポテンシャルのフーリエ成分と形式的には一致する．したがって，公式 (139.1) に従って

$$\varphi_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{r}_a)=\frac{4\pi}{q^2}e^{-i\boldsymbol{qr}_a} \qquad (148.5)$$

となる．この式を (148.4) に代入し，最終的に，非弾性衝突の断面積に対する次のような一般式に到達する：

$$d\sigma_n=\left(\frac{e^2m}{\hbar^2}\right)^2\frac{4k'}{kq^4}|\langle n|\sum_a e^{-i\boldsymbol{qr}_a}|0\rangle|^2 do \qquad (148.6)$$

ここで，われわれは，運動量 $\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'$ の代わりに波動ベクトル $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{p}/\hbar$，$\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{p}'/\hbar$ を導入した．この公式は，電子が立体角要素 do に散乱され，原子が n 番目の励起状態に遷移するような衝突の確率を決定する．ベクトル $-\hbar\boldsymbol{q}$ は，衝突の際に電子から原子に移される運動量である．

計算の際に，立体角要素に対してではなく，ベクトル $\boldsymbol{q}$ の絶対値の要素 dq に対する断面積を扱った方がつごうがよい．ベクトル $\boldsymbol{q}$ は $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}$ で定義される．これの絶対値に対しては

$$q^2=k^2+k'^2-2kk'\cos\vartheta \qquad (148.7)$$

1）この形にすると，これは，2粒子の重心が静止している座標系での散乱の断面積を決定する摂動論の一般公式である（m は2粒子の換算質量である）．この式は電子と原子の衝突だけでなく，任意の2粒子の非弾性衝突に対しても適用可能である．

となる．ここから，k, k' が与えられたとき，すなわち電子のエネルギー損失が与えられたとき，

$$qdq = kk' \sin\vartheta d\vartheta = \frac{kk'}{2\pi} do \tag{148.8}$$

である．したがって，公式 (148.6) は

$$d\sigma_n = 8\pi\left(\frac{e^2}{\hbar v}\right)^2 \frac{dq}{q^3} |\langle n|\sum_a e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a}|0\rangle|^2 \tag{148.9}$$

の形に書くことができる．

これから先のすべての計算では，ベクトル $\mathbf{q}$ は重要な役割を演ずる．これと散乱角 ϑ，および，衝突の際に移されるエネルギー $E_n - E_0$ との関係をさらに詳しく考察しよう．われわれは以下では，入射電子のエネルギー $E = mv^2/2$ と比べて小さいエネルギー移動を伴う小さい角度 ($\vartheta \ll 1$) の散乱をひき起こす衝突が基本的な役割を演ずることを見るだろう．すなわち $E_n - E_0 \ll E$ である．このとき差 $k - k'$ もまた小さい ($k - k' \ll k$)．したがって，

$$E_n - E_0 = \frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - k'^2) \approx \frac{\hbar^2}{m} k(k - k') = \hbar v(k - k')$$

である．ϑ が小さいために，(148.7) から $q^2 \approx (k - k')^2 + (k\vartheta)^2$ となり，最終的には

$$q = \sqrt{\left(\frac{E_n - E_0}{\hbar v}\right)^2 + (k\vartheta)^2} \tag{148.10}$$

となる．q の極小値は

$$q_{\min} = \frac{E_n - E_0}{\hbar v} \tag{148.11}$$

となる．

小さい角度のときさらに，小さい量 ϑ と v_0/v (v_0 は原子内電子の速度の程度の量である) の関係によって，異なる領域を区別することができる．もしも原子内電子のエネルギー ε_0 の程度のエネルギーの移動を考察すれば ($E_n - E_0 \sim \varepsilon_0 \sim mv_0^2$)，$(v_0/v)^2 \ll \vartheta \ll 1$ のとき

$$q = k\vartheta = \frac{mv}{\hbar}\vartheta \tag{148.12}$$

である ((148.10) の根号内の第 1 項は第 2 項に比べて落とされた)．したがって，この角度領域では，q は移されるエネルギーの大きさに依存しない．$\vartheta \ll 1$

のとき，q の大きさは $1/a_0$ に比べて大きくも小さくもなり得る（ここで a_0 は原子の大きさの程度の量である）．移されるエネルギーの大きさについてまったく同じ仮定をすると，

$$\vartheta \sim \frac{v_0}{v} \text{ のとき} \qquad qa_0 \sim 1 \tag{148.13}$$

となる．

今度は一般式 (148.9) の研究に立ちもどって，q が小さい（$qa_0 \ll 1$，すなわち $\vartheta \ll v_0/v$ の）場合を考察しよう．

この場合，指数関数因子を $\boldsymbol{q}$ のベキで展開することができる：$e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}_a} \approx 1 - i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}_a = 1 - iqx_a$（$x$ 軸をベクトル $\boldsymbol{q}$ の方向に選ぶ）．この展開を (148.9) に代入すると，1 の項は波動関数 ψ_0 と ψ_n の直交性のためにゼロになり，

$$d\sigma_n = 8\pi\left(\frac{e}{\hbar v}\right)^2 \frac{dq}{q} |\langle n|d_x|0\rangle|^2 = \left(\frac{2e}{\hbar v}\right)^2 |\langle n|d_x|0\rangle|^2 \frac{do}{\vartheta^2} \tag{148.14}$$

を得る．ここで $d_x = e\sum x_a$ は原子の双極モーメントの x-成分である．（小さい q のとき）散乱断面積は，原子状態の変化に対応する遷移に対する双極モーメントの行列要素の絶対値の自乗で決定されることがわかる[1]．

しかしながら，あたえられた遷移に対する双極モーメントの行列要素は，選択規則（禁止遷移）のために恒等的にゼロであることもあり得る．このとき，$\exp(i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}_a)$ の展開は次の項まで続ける必要があり，

$$d\sigma_n = 2\pi\left(\frac{e^2}{\hbar v}\right)^2 |\langle n|\sum_a x_a^2|0\rangle|^2 q\,dq \tag{148.15}$$

を得る．

今度は q の大きい（$qa_0 \gg 1$）逆の極限の場合を考察しよう．q が大きいことは，原子内電子の始めの固有運動量に比べて大きい運動量が原子に移されることを意味する．物理的にあらかじめ明らかなことは，この場合に，原子内電子を自由とみなすことができ，原子との衝突を，入射電子と始めに静止している原子内電子との衝突と見ることができることである．これはまた一般式 (148.9) からもわかる．$\boldsymbol{q}$ が大きいとき，被積分式は急速に振動する因子 $\exp(-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}_a)$

---

1) 終状態の原子の角運動量のすべての方向について和をとり，始状態の角運動量の方向について平均されたふつうの断面積 $d\sigma_n$ が物理的には重要である．このような和および平均ののち，$|\langle n|d_x|0\rangle|^2$ はもはや x 軸の方向には依存しない．

を含み，ψ_n が同じような因子を含むときだけ，積分はゼロに近くない．このような関数 ψ_n は，原子から運動量 $-\hbar \boldsymbol{q}=\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'$——すなわち，二つの自由電子の衝突の際に成り立つはずの，運動量の保存則によって決定される運動量——をもって飛び出す電子を伴う電離原子に対応する．

大きい運動量の移動を伴う衝突の際に，両方の（入射および原子内の）電子は結果として，大きさについては同程度の速度を獲得することができる．これに関連して，一般式 (148.9) では注意しなかった交換効果が重要になる．これは衝突粒子が同等であることと関連している．交換を考慮したはやい電子の散乱断面積は，公式 (137.9) で定義されている；この公式は，電子の一つが衝突前に静止していた座標系に関するものである．はやい電子に対して，(137.9) の中の最後の項の余弦は 1 と置きかえることができる．また原子内の電子の数 Z を掛けて，電子と原子の衝突の断面積が次の形に得られる：

$$d\sigma=4Z\left(\frac{e^2}{mv^2}\right)^2\left(\frac{1}{\sin^4\vartheta}+\frac{1}{\cos^4\vartheta}-\frac{1}{\sin^2\vartheta\cos^2\vartheta}\right)\cos\vartheta\, do. \qquad (148.16)$$

この公式で，衝突後に電子が獲得するエネルギーを使って散乱角をあらわすと便利である．よく知られているように，エネルギー $E=mv^2/2$ をもつ粒子と，静止している同質量の粒子との衝突の際に，衝突後の両粒子のエネルギーは $\varepsilon=E\sin^2\vartheta$, $E-\varepsilon=E\cos^2\vartheta$ に等しい．区間 $d\varepsilon$ に関する断面積を得るために，関係式 $\cos\vartheta do=2\pi\cos\vartheta\sin\vartheta d\vartheta=(\pi/E)d\varepsilon$ に従って，do を $d\varepsilon$ であらわそう．(148.16) に代入して，最終的な公式

$$d\sigma_\varepsilon=\pi Ze^4\left[\frac{1}{\varepsilon^2}+\frac{1}{(E-\varepsilon)^2}-\frac{1}{\varepsilon(E-\varepsilon)}\right]\frac{d\varepsilon}{E} \qquad (148.17)$$

を得る．もしもエネルギー ε あるいは $E-\varepsilon$ の中の一つが他に比べて小さければ，この公式の 3 項のなかで（1 番目か 2 番目の）一つだけが重要である．二つの電子のエネルギーの差が大きいときには，交換効果は重要でなくなり，われわれはふつうのラザフォードの公式にもどることになる[1]．

微分断面積の全角度についての（あるいは同じことだが，q についての）積分は，与えられた原子状態への励起を伴う衝突の全断面積を与える．σ_n の入射電子速度への依存性は，原子の双極モーメントの対応する遷移に対する行列要素

1) 陽電子と原子の衝突に対しては，交換効果は一般に存在しない．そしてラザフォードの公式 $d\sigma_\varepsilon=(\pi Ze^4/E)d\varepsilon/\varepsilon^2$ は $q\gg 1/a_0$ のすべてに対して成立する．

が存在するか存在しないかに全面的に依存している．始めに，この行列要素がゼロと異なるとしよう．q が小さいとき，$d\sigma_n$ は公式 (148.14) によって与えられ，q が小さくなると，q についての積分は対数的に発散する．ところが q の大きい領域では，（エネルギーの移動 E_n-E_0 が与えられたとき）断面積は q の増大に伴って指数関数的に減少する．これはすでに指摘された式 (148.9) の被積分式内の急速に振動する因子の存在と関係がある．このようにして，q に関する積分中の主要な役割は q の小さい領域が演じており，われわれは積分範囲を極小値 $q_{\min}$ (148.11) から $\sim 1/a_0$ 程度のある値までに限ることができる．その結果

$$\sigma_n = 8\pi\left(\frac{e}{\hbar v}\right)^2 |\langle n|d_x|0\rangle|^2 \log\left(\beta_n \frac{v\hbar}{e^2}\right) \qquad (148.18)$$

を得る．ここで β_n は次元のない量で，一般的な形では計算できない[1]．

もしも与えられた遷移に対して，双極モーメントの行列要素がゼロになれば，q についての積分は q の小さい値のとき（これは (148.15) からわかる）にも，大きい q のときにも急速に収束する．この場合に $q\sim 1/a_0$ の領域が積分には重要である．ここでは一般的な定量的な公式は得られない．われわれは，σ_n が速度の自乗に逆比例すると結論することができるだけである：

$$\sigma_n = \frac{\text{const}}{v^2}. \qquad (148.19)$$

これは一般式 (148.9) から直接に出てくる．これによると $q\sim 1/a_0$ のとき，$d\sigma_n$ は v^{-2} に比例する．

原子がどの状態に遷移するかとは無関係に，与えられた立体角要素への非弾性散乱の有効断面積 $d\sigma_{in}$ を決定しよう．このためには (148.9) の式をすべての $n\neq 0$ について，すなわち（離散スペクトルも連続スペクトルも含めて）すべての原子状態について，基底状態は除いて加える必要がある．われわれは大きい角度や全く小さい角度領域を考察から除こう．したがって $1\gg\vartheta\gg(v_0/v)^2$ である．このとき (148.12) に従って，q は移されるエネルギーには依存しな

1) われわれは，E_n-E_0 が原子内電子のエネルギー ε_0 の程度と考える．エネルギーの上限では ($E_n-E_0\sim E\gg\varepsilon_0$)，公式 (148.14)，(148.18) はすべて等しく使用不能である．それは双極モーメントの行列要素が非常に小さく，q についての展開の第1項に限ってはいけないからである．

い[1].

この最後の事情のために，非弾性衝突の全断面積，すなわち和

$$d\sigma_r=\sum_{n\neq 0} d\sigma_n=8\pi\left(\frac{e^2}{\hbar v}\right)^2\sum_{n\neq 0}|\langle n|\sum_a e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}_a}|0\rangle|^2\frac{dq}{q^3}$$
$$=\left(\frac{2e^2}{mv^2}\right)^2\sum_{n\neq 0}|\langle n|\sum_a e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}_a}|0\rangle|^2\frac{do}{\vartheta^4} \qquad (148.20)$$

は容易に計算できる.

このためには，すべての量 f に対し，行列の乗算則に従って

$$\sum_n|f_{0n}|^2=\sum_n f_{0n}(f_{0n})^*=\sum_n f_{0n}(f^+)_{n0}=(ff^+)_{00}$$

が成り立つことに注意しよう. ここでは和は $n=0$ を含むすべての n について行なわれる. したがって

$$\sum_{n\neq 0}|f_{0n}|^2=\sum_n|f_{0n}|^2-|f_{00}|^2=(ff^+)_{00}-|f_{00}|^2 \qquad (148.21)$$

となる.

この関係式を $f=\sum e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}_a}$ に適用し

$$d\sigma_r=\left(\frac{2e^2}{mv^2}\right)^2\{\langle|\sum_a e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}_a}|^2\rangle-|\langle\sum_a e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}_a}\rangle|^2\}\frac{do}{\vartheta^4} \qquad (148.22)$$

を得る. ここで $\langle\cdots\rangle$ は原子の基底状態について平均（すなわち，対角要素 00 をとること）を意味する. 平均値 $\langle\sum e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}_a}\rangle$ は，定義により，基底状態の原子の原子形状因子 $F(q)$ である. これに対し，括弧内の第1項は

$$|\sum_{a=1}^{Z} e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}_a}|^2=Z+\sum_{a\neq b} e^{i\boldsymbol{q}(\boldsymbol{r}_a-\boldsymbol{r}_b)}$$

と書くことができる. このようにして一般公式

$$d\sigma_r=\left(\frac{2e^2}{mv^2}\right)^2\{Z-F^2(q)+\langle\sum_{a\neq b} e^{i\boldsymbol{q}(\boldsymbol{r}_a-\boldsymbol{r}_b)}\rangle\}\frac{do}{\vartheta^4} \qquad (148.23)$$

を得る.

この公式は q が小さいときに非常に簡単になる. このときは，q のベキ展開を行なうことができる（$v_0/v\ll qa_0\ll 1$ は角度 $(v_0/v)^2\ll\vartheta\ll v_0/v$ に対応する). 公式 (148.23) における展開を行なうかわりに，$d\sigma_n$ に対して式 (148.14) を使

1) (148.9) の和は $E_n-E_0\gg\varepsilon_0$ の状態に関して行なわれる. これに対しては (148.12) は成立しない. しかしながら，エネルギーの移動が大きい遷移に対しては，断面積は比較的小さい. この項は和の中では小さい役割を演ずる. 条件 $\vartheta\ll 1$ のときには交換効果を考慮しなくてもよい.

って，ふたたび n についての和をとると便利である．$f=d_x$ とした関係式 (148.21) を使って和をとり $\langle d_x\rangle=0$ を考えて，

$$d\sigma_r=\left(\frac{2e}{\hbar v}\right)^2\langle d_x^2\rangle\frac{do}{\vartheta^2} \tag{148.24}$$

を得る．

この式と，小さい角の弾性散乱の有効断面積の式 (139.5) とを比べることは興味がある．このとき後者は ϑ に依存しないのに，立体角要素 do への非弾性散乱の断面積は，ϑ が減少するにつれて $1/\vartheta^2$ のように増大する．

角度が $1\gg\vartheta\gg v_0/v$（したがって $qa_0\gg1$）のとき，(148.23) の波括弧内の第2および第3項は小さい．われわれは単に

$$d\sigma_r=Z\left(\frac{2e^2}{mv^2}\right)^2\frac{do}{\vartheta^4} \tag{148.25}$$

を得る．すなわち，当然ながらわれわれは Z 個の原子内電子による（交換を考慮しない）ラザフォード散乱を得る．弾性散乱の微分断面積 (139.6) は Z でなく Z^2 に比例することを思い起こそう．

最後に，角度で積分して，われわれは全方向の，原子のあらゆる励起を含む非弾性散乱の全断面積 σ_r を得る．σ_n の計算 (148.18) と同様のやりかたで

$$\sigma_r=8\pi\left(\frac{e}{\hbar v}\right)^2\langle d_x^2\rangle\log\left(\beta\frac{v\hbar}{e^2}\right) \tag{148.26}$$

を得る．

問　　題[1)]

1. （基底状態にある）水素原子による，はやい電子の非弾性散乱の（$1\gg\vartheta\gg v^{-2}$ のときの）角度分布を決定せよ．

解　水素原子に対して (148.23) の波乱弧内の第3項はなくなる．そして原子形状因子 $F(q)$ は §139 の問題で計算された．これを代入して

$$d\sigma_r=\frac{4}{v^4\vartheta^4}\left[1-\left(1+\frac{v^2\vartheta^2}{4}\right)^{-4}\right]do$$

を得る．

2. 基底状態の水素原子に電子が衝突して，離散スペクトルの n 番目の準位に励起される微分断面積を決定せよ（n は主量子数である）．

解　行列要素の計算は放物座標で行なうと便利である．z 軸をベクトル $\boldsymbol{q}$ の方向に選ぶ

1)　問題ではすべて原子単位が使われる．

と，$e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}=e^{iqz}=e^{iq(\xi-\eta)/2}$ となる．基底状態の波動関数は $\psi_{000}=\pi^{-1/2}e^{-(\xi+\eta)/2}$ の形をもつ．行列要素は $m=0$ をもつ状態への遷移に対してのみゼロと異なる．これらの状態の波動関数は，関数

$$\psi_{n_1n_20}=\frac{1}{\sqrt{\pi}\,n^2}e^{-(\xi+\eta)/2n}F\left(-n_1,\ 1,\ \frac{\xi}{n}\right)F\left(-n_2,\ 1,\ \frac{\eta}{n}\right)$$

である $(n=n_1+n_2+1)$．求める行列要素は積分

$$\langle n_1n_20|e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}|000\rangle=\iint_0^\infty e^{i(q/2)(\xi-\eta)}\psi_{000}\psi_{n_1n_20}\frac{(\xi+\eta)}{4}2\pi d\xi d\eta$$

で与えられる．積分は，数学的補遺の § f で導かれた公式を使って行なわれる．計算の結果，

$$|\langle n_1n_20|e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}|000\rangle|^2=2^8n^6q^2\frac{[(n-1)^2+(qn)^2]^{n-3}}{[(n+1)^2+(qn)^2]^{n+3}}[(n_1-n_2)^2+(qn)^2]$$

が得られる．同一の $n_1+n_2=n-1$ をもつすべての状態は同一エネルギーをもつ．与えられた n のときに，n_1-n_2 のすべての可能な値について加え，結果を (148.9) に代入して，求める断面積を得る：

$$d\sigma_n=\frac{2^{11}\pi}{v^2}n^7\left[\frac{n^2-1}{3}+(qn)^2\right]\frac{[(n-1)^2+(qn)^2]^{n-3}}{[(n+1)^2+(qn)^2]^{n+3}}\frac{dq}{q}.$$

3. 水素原子の第 1 励起状態の励起に対する全断面積を決定せよ．

解 $q_{\min}=(E_2-E_1)/v=3/8v$ から $q_{\max}=2v$ までのすべての q について

$$d\sigma_2=\frac{2^8\pi}{v^2}\frac{dq}{q(q^2+9/4)^5}$$

を積分する必要がある．このとき v についての最高ベキの項だけを残す必要がある．積分は初等的に行なわれ[1)]

$$\sigma_2=\frac{2^{18}\pi}{3^{10}v^2}\left(\log 4v-\frac{25}{24}\right)=\frac{4\pi}{v^2}\cdot 0.555\log\frac{v^2}{0.50}$$

を与える．

4. (基底状態にある) 水素原子が電離して，2 次電子が一定の方向に飛び去る断面積を決定せよ；2 次電子のエネルギーは 1 次電子のエネルギーに比べて小さい．したがって，交換効果は重要でない (H. Massey, C. Mohr, 1933).

解 始状態の原子の波動関数は $\psi_0=\pi^{-1/2}e^{-r}$ である．終状態では原子は電離し，それから飛び去る 2 次電子はある波動ベクトルをもつ．それを $\boldsymbol{\kappa}$ とおこう (エネルギーは $\kappa^2/2$ である)．この状態は関数 $\psi_{\boldsymbol{\kappa}}^{(-)}$ (136.9) で記述され，このなかで《飛び出す》部分は (無限遠で) $\boldsymbol{\kappa}$ 方向に伝播する平面波だけからなっている．関数 $\psi_{\boldsymbol{\kappa}}^{(-)}$ は $\boldsymbol{\kappa}/2\pi$–空間の δ–関

---

1) 断面積は任意の n に対して計算できる．数値計算によって水素原子の非弾性散乱の全断面積も得ることができる：$\sigma_r=\frac{4\pi}{v^2}\log\frac{v^2}{0.160}$. その中で，離散スペクトルの状態の励起を伴う衝突，および電離を伴う衝突はそれぞれ：

$$\sigma_{\rm exci}=\frac{4\pi}{v^2}\cdot 0.715\log\frac{v^2}{0.45},\qquad \sigma_{\rm ion}=\frac{4\pi}{v^2}\cdot 0.285\log\frac{v^2}{0.012}.$$

数で規格化される．したがって，これを使って計算された断面積は $d^3\kappa/(2\pi)^3$ あるいは $\kappa^2 d\kappa do_\kappa/(2\pi)^3$ に関するものである．ここで do_κ は2次電子の方向に対する立体角である．このようにして

$$d\sigma=\frac{4k'\kappa^2}{(2\pi)^3kq^4}|\langle\boldsymbol{\kappa}|e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}|0\rangle|^2 do do_\kappa d\kappa$$

(do は散乱電子の立体角要素である)．ここで

$$\langle\boldsymbol{\kappa}|e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}|0\rangle=\int\psi_{\boldsymbol{\kappa}}^{(-)*}e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}\psi_0 dV=\frac{e^{\pi/2\kappa}\Gamma(1-i/\kappa)}{\pi^{1/2}}I,$$

$$I=\left\{-\frac{\partial}{\partial\lambda}\int\exp\left(-i\mathbf{q}\mathbf{r}-i\boldsymbol{\kappa}\mathbf{r}-\lambda r\right)F\left(\frac{i}{\kappa},\ 1,\ i(\kappa r+\boldsymbol{\kappa}\mathbf{r})\right)\frac{dV}{r}\right\}_{\lambda=1}$$

である．$\boldsymbol{\kappa}$ 方向に z 軸をもち，角度 φ を面 $(\mathbf{q},\boldsymbol{\kappa})$ からはかるような放物座標で積分を行なう：

$$I=\left\{-\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\lambda}\int_0^\infty\int_0^\infty\int_0^{2\pi}\exp\left\{-\frac{i}{2}q(\xi-\eta)\cos\gamma+iq\sqrt{\xi\eta}\sin\gamma\cos\varphi\right.\right.$$
$$\left.\left.-\frac{\lambda}{2}(\xi+\eta)-\frac{i}{2}\kappa(\xi-\eta)\right\}F\left(\frac{i}{\kappa},\ 1,\ i\kappa\xi\right)d\varphi d\xi d\eta\right\}_{\lambda=1}$$

(γ は $\boldsymbol{\kappa}$ と $\mathbf{q}$ との間の角である)．$d\varphi d\eta$ についての積分は，$\sqrt{\eta}\cos\varphi=u$，$\sqrt{\eta}\sin\varphi=v$ を代入することによって容易に行なうことができる．そして

$$\frac{I}{2\pi}=\left\{\frac{\partial}{\partial\lambda}\int_0^\infty\exp\left\{-\frac{q^2\sin^2\gamma+\lambda^2+(\kappa+q\cos\gamma)^2}{2[i(\kappa+q\cos\gamma)-\lambda]}\xi\right\}\frac{F(i/\kappa,\ 1,\ i\kappa\xi)d\xi}{[i(\kappa+q\cos\gamma)-\lambda]}\right\}_{\lambda=1}$$

を得る．ここにある積分は公式 (f.3) で $\gamma=1$，$n=0$ としたものである．これから先の計算は長いが初等的である．そしてその結果，断面積に対して次のような式が得られる：

$$d\sigma=\frac{2^8k'\kappa[q^2+2q\kappa\cos\gamma+(\kappa^2+1)\cos^2\gamma]}{\pi kq^2[q^2+2q\kappa\cos\gamma+1+\kappa^2]^4[(q+\kappa)^2+1][(q-\kappa)^2+1](1-e^{-2\pi/\kappa})}$$
$$\times\exp\left(-\frac{2}{\kappa}\tan^{-1}\frac{2\kappa}{q^2-\kappa^2+1}\right)do do_\kappa d\kappa.$$

2次電子の放出のすべての角度についての積分は初等的に行なわれる．その結果放出される電子のエネルギー $\kappa^2/2$ が与えられたとき，散乱の方向に関する分布が得られる：

$$d\sigma=\frac{2^{10}k'\kappa}{kq^2}\frac{\left[q^2+\frac{1}{3}(1+\kappa^2)\right]\exp\left(-\frac{2}{\kappa}\tan^{-1}\frac{2\kappa}{q^2-\kappa^2+1}\right)}{[(q+\kappa)^2+1]^3[(q-\kappa)^2+1]^3(1-e^{-2\pi/\kappa})}do d\kappa.$$

$q\gg1$ のとき，この式は $\kappa\approx q$ で鋭い極大をもつ．極大の近くでは

$$d\sigma=\frac{2^5}{3\pi\kappa^4}\frac{d\kappa do}{[1+(q-\kappa)^2]^3}$$

である．$do=2\pi qdq/k^2\approx(2\pi\kappa/k^2)d(q-\kappa)$ について積分し，$8\pi d\kappa/k^2\kappa^3$ という式を得る．これは当然のことながら，公式 (148.17) の第1項と一致する．

§ 149. 有効制動

衝突理論の応用の中で，衝突粒子の平均エネルギー損失の計算は重要であ

る．量

$$d\kappa=\sum_n (E_n-E_0)d\sigma_n \tag{149.1}$$

によって，この損失をあらわすと便利である．これをわれわれは（微分）**有効制動**と呼ぶ．もちろん，和は離散スペクトルの状態についても，連続スペクトルの状態についても行なわれる．$d\kappa$ は与えられた立体角要素への散乱に対するものである[1]．

はやい電子の有効制動の一般式は次のような形になる：

$$d\kappa=8\pi\left(\frac{e^2}{\hbar v}\right)^2\sum_n (E_n-E_0)|\langle n|\sum_a e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a}|0\rangle|^2\frac{dq}{q^3} \tag{149.2}$$

（$d\sigma_n$ は (148.9) からとった）．(148.23) を導くときと同様に，小さい角度領域を考察からはずし，ふたたび $1\gg\vartheta\gg(v_0/v)^2$ と考えよう．このとき q は移されるエネルギーの大きさにはよらず，n についての和は一般形で計算できる．

和は，次のようにして導かれる**総和則**を使って計算される．（座標の関数である）ある量 f およびその時間微分 $\dot{f}$ の行列要素は，公式

$$(\dot{f})_{0n}=-\frac{i}{\hbar}(E_n-E_0)f_{0n} \tag{149.3}$$

により互いに結ばれている．したがって

$$\sum_n (E_n-E_0)|f_{0n}|^2=\sum_n (E_n-E_0)f_{0n}(f_{0n})^*$$
$$=\sum_n (E_n-E_0)f_{0n}(f^+)_{n0}=i\hbar\sum_n (\dot{f})_{0n}(f^+)_{n0}=i\hbar(\dot{f}f^+)_{00}$$

となる．原子の定常状態の波動関数は実数に選ぶことができる．このとき座標の関数である f の行列要素は，関係式 $f_{0n}=f_{n0}$ で結ばれる．そして行列要素 (149.3) に対しては，$(\dot{f})_{0n}=-(\dot{f})_{n0}$ が成り立つ．したがって，考察される和はまた

$$-i\hbar\sum_n (f^+)_{0n}(\dot{f})_{n0}=-i\hbar(f^+\dot{f})_{00}$$

の形に書かれる．二つの式の和の半分をとり，求める総和則を得る：

$$\sum_n (E_n-E_0)|f_{0n}|^2=\frac{i\hbar}{2}(\dot{f}f^+-f^+\dot{f})_{00}. \tag{149.4}$$

---

1) もしも電子が気体を通過すれば，種々の原子での散乱は独立に行なわれ，$Nd\kappa$（N は気体の単位体積中の原子数）という量は，与えられた立体角要素へ電子を曲げるような衝突の際に，電子がその道の単位長さごとに失うエネルギーである．

これを量 $f=\sum_a e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a}$ に適用しよう．(19.2) に従って，これの時間微分は演算子

$$\hat{\dot{f}}=-\frac{\hbar}{2m}\sum_a\left[e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a}(\mathbf{q}\nabla_a)+(\mathbf{q}\nabla_a)e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a}\right]$$

によって記述される．$\hat{\dot{f}}$ と $\hat{f}^+$ との交換の結果は，直接計算すると容易である．すなわち

$$\hat{\dot{f}}\hat{f}^+-\hat{f}^+\hat{\dot{f}}=-\frac{i\hbar}{m}q^2Z$$

となる．(149.4) に代入して，公式

$$\sum_n\frac{2m}{\hbar^2q^2}(E_n-E_0)\,|\langle n|\sum_a e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a}|0\rangle|^2=Z \tag{149.5}$$

を得る．これはわれわれに必要な和を行なっている[1]．

このようにして，微分有効制動に対して公式

$$d\kappa=4\pi\frac{Ze^4}{mv^2}\frac{dq}{q}=\frac{2Ze^4}{mv^2}\frac{do}{\vartheta^2} \tag{149.6}$$

を得る．これの適用可能の領域は不等式 $(v_0/v)^2\ll\vartheta\ll1$，すなわち $v_0/v\ll a_0q\ll v/v_0$ で与えられる．

さらに，$v_0/v\ll a_0q_1\ll v/v_0$ であるようなある値 q_1 を越えない運動量移動を伴うすべての衝突に対する全有効制動 $\kappa(q_1)$ を決定しよう．すなわち

$$\kappa(q_1)=\sum_n\int_{q_{\min}}^{q_1}(E_n-E_0)d\sigma_n \tag{149.7}$$

である．$q_{\min}$ は公式 (148.11) で与えられる．積分記号は和の記号から出してはいけない．それは $q_{\min}$ が n に依存するからである．

積分領域を二つの部分に分ける．すなわち $q_{\min}$ から q_0 までと，q_0 から q_1 までである．ここで q_0 は $v_0/v\ll q_0a_0\ll1$ であるような q のある値である．このとき，$q_{\min}$ から q_0 までの全積分領域で，$d\sigma_n$ に対して (148.14) の式を使うことができる．すなわち

$$\kappa(q_0)=8\pi\left(\frac{e}{\hbar v}\right)^2\sum_n|\langle n|d_x|0\rangle|^2(E_n-E_0)\int_{q_{\min}}^{q_0}\frac{dq}{q}.$$

これから

---

1) この関係式を導くとき，われわれは添字0をつけた状態は原子の基底状態であるという事実は使っていない．したがって，これは任意の始状態に対して成立する．

$$\kappa(q_0)=8\pi\left(\frac{e}{\hbar v}\right)^2\sum_n|\langle n|d_x|0\rangle|^2(E_n-E_0)\log\frac{q_0\hbar v}{E_n-E_0}\qquad(149.8)$$

となる．これに対し q_0 から q_1 までの領域では，始めに n についての和を行なうことができる．その結果 $d\kappa$ に対する式 (149.6) が得られ，これは q について積分すると

$$\kappa(q_1)-\kappa(q_0)=4\pi\frac{Ze^4}{mv^2}\log\frac{q_1}{q_0}\qquad(149.9)$$

を与える．

得られた式を変形するために，公式 (149.4) のなかに

$$\hat{f}=\frac{d_x}{e}=\sum_a x_a,\qquad \hat{\dot{f}}=\frac{1}{m}\sum_a \hat{p}_{xa}$$

と置いて得られる総和則が使われる．$\hat{f}^+$ と $\hat{\dot{f}}$ との交換の結果は（この場合には $\hat{f}^+$ は $\hat{f}$ と一致する）$\hat{\dot{f}}\hat{f}^+-\hat{f}^+\hat{\dot{f}}=-\dfrac{i\hbar}{m}Z$ を与える．したがって

$$\sum_n N_{0n}\equiv\sum_n\frac{2m}{(e\hbar)^2}(E_n-E_0)|\langle n|d_x|0\rangle|^2=Z\qquad(149.10)$$

である[1]．量 N_{0n} を対応する遷移に対する**振動子の強さ**と呼ぶ．

公式

$$\log I=\frac{\sum_n N_{0n}\log(E_n-E_0)}{\sum_n N_{0n}}=\frac{1}{Z}\sum_n N_{0n}\log(E_n-E_0)\qquad(149.11)$$

によって定義される原子のエネルギーのある平均値 I を導入しよう．このとき，総和則 (149.10) を使って，公式 (149.8) は $\kappa(q_0)=\dfrac{4\pi Ze^4}{mv^2}\log\dfrac{q_0\hbar v}{I}$ の形に書き直すことができる．(149.9) といっしょにして最終的に

$$\kappa(q_1)=\frac{4\pi Ze^4}{mv^2}\log\frac{q_1\hbar v}{I}\qquad(149.12)$$

を得る．この公式には，与えられた原子を特徴づける定数がただ一つ含まれる[2]．

---

1) (149.5) を導くために行なった注意は，この関係式に対しても成立する．

2) 水素に対しては $I=0.55me^4/\hbar^2=14.9\,\mathrm{eV}$ である．重い原子に対しては，もしも定数 I をトーマス＝フェルミの方法を使って計算すれば，よい精度が期待される．このように計算された I の値が Z にどう依存するかは容易に確立される．準古典的な場合には，エネルギー準位の差は粒子系の固有振動数に対応する．原子の平均固有振動数は v_0/a_0 の程度の大きさである．したがって，$I\sim\hbar v_0/a_0$ と結論できる．トーマス＝フェルミ模型での原子内電子の速度は $Z^{2/3}$ のように，そして原子の大きさは $Z^{-1/3}$ のように Z に依存する．このようにして，I は Z に比例しなければならない：$I=\mathrm{const}\cdot Z$．実験データから，const は 10 eV の程度の大きさであると結論される．

$q_1=mv\vartheta_1/\hbar$ に従って q_1 を散乱角 ϑ_1 を使ってあらわすと，$\vartheta\leqq\vartheta_1$ のすべての角への散乱による有効制動

$$\kappa(\vartheta_1)=4\pi\frac{Ze^4}{mv^2}\log\frac{mv^2\vartheta_1}{I} \qquad (149.13)$$

を得る．もしも $q_1a_0\gg1$（すなわち，$\vartheta_1\gg v_0/v$）ならば，入射電子により原子に与えられ得る最大エネルギーの関数として，κ をあらわすことができる．$qa_0\gg1$ のときには，実際上すべての運動量 $\hbar\boldsymbol{q}$ およびエネルギーが，一つの原子内電子に与えられるような原子の電離が起こり得ることが，前節で示された．したがって，$\hbar\boldsymbol{q}$ と ε は電子の運動量とエネルギーとして互いに結ばれる．すなわち $\varepsilon=\hbar^2q^2/2m$ である．(149.12) に $q_1^2=2m\varepsilon_1/\hbar^2$ を代入して，エネルギー $\varepsilon\leq\varepsilon_1$ の移動を伴う衝突による有効制動

$$\kappa(\varepsilon_1)=\frac{2\pi Ze^4}{mv^2}\log\frac{2m\varepsilon_1v^2}{I^2} \qquad (149.14)$$

を得る．

終りに次のような注意をしよう．原子の離散スペクトルのエネルギー準位は，主として一つの（外殻）電子の励起によるものである．ふつう，2電子励起はすでに原子の電離に十分なエネルギーを必要とする．したがって，振動子の強さの和のなかで，離散スペクトルの状態への遷移は1の程度の割合を占めるだけである．ところが電離を伴う遷移は Z の程度である．これから，（重い原子の）制動の主役は，電離を伴う衝突が演じている．

問　　題

水素原子による電子の全有効制動を決定せよ（$I=0.55$ 原子単位）．エネルギー移動が大きいとき，二つの衝突電子のなかではやい方は1次電子とみなされる．

解　衝突後1次電子と2次電子が同程度のエネルギーを獲得するときは，交換効果を考慮する必要がある．したがって，（$1\ll\varepsilon_1\ll v^2$ の）ある値 ε_1 から最大値 $\varepsilon_{\max}=E/2=v^2/4$（われわれが採用した1次電子の定義がある!）までのエネルギー移動を伴う制動に対して，断面積 (148.17) を使う必要がある：

$$\kappa(\varepsilon_{\max})-\kappa(\varepsilon_1)=\frac{\pi}{E}\int_{\varepsilon_1}^{E/2}\varepsilon\left[\frac{1}{\varepsilon^2}+\frac{1}{(E-\varepsilon)^2}-\frac{1}{\varepsilon(E-\varepsilon)}\right]d\varepsilon=\frac{\pi}{E}\left(\log\frac{E}{8\varepsilon_1}+1\right),$$

(149.14) といっしょにして（原子単位で）

$$\kappa=\frac{4\pi}{v^2}\log\left(\frac{v^2}{2I}\sqrt{\frac{e}{2}}\right)=\frac{4\pi}{v^2}\log\frac{v^2}{1.3}$$

を得る[1].

§ 150. 重い粒子と原子の非弾性衝突

重い粒子と原子の衝突に対するボルン近似の適用可能条件は，粒子の速度によってあらわすと電子に対するものと同じになる．すなわち $v \gg v_0$ である．これは，もしも次の点に気づけば摂動論の適用可能な一般的条件 (126.2) $Ua_0/\hbar v \ll 1$ から直接に出てくる；この条件の中には粒子の質量は含まれないし，また $Ua_0/\hbar$ は原子内電子の速度の程度の大きさであることである．

原子と粒子の重心が静止している系では，断面積は一般式 (148.3) で決定される（ここでいまは m を粒子と原子の換算質量と考える必要がある）．しかしながら，（衝突前に）散乱を起こす原子が静止している座標系で衝突を考察する方が便利である．そのためには公式 (148.1) から始めよう．衝突前原子が静止している座標系では，δ-関数の引数はエネルギー保存則をあらわして，

$$\frac{p'^2}{2M}-\frac{p^2}{2M}+\frac{(p'-p)^2}{2M_a}+E_n-E_0 \qquad (150.1)$$

の形をもつ．ここで M は入射粒子の質量，M_a は原子の質量である．第3項は原子の反跳の運動エネルギーである（これは電子との衝突の際には完全に無視される）．

はやい重粒子と原子との衝突の際に，粒子の運動量の変化はいつも始めの運動量に比べると小さい．もしもこの条件が満足されると，δ-関数の引数の中で原子の反跳のエネルギーを無視できる．そうすると，われわれは正確に公式 (148.3) にもどってしまう．そこでは m を入射粒子の質量 M（粒子と原子の換算質量ではない！）に代えさえすればよい．運動量の移動が始めの運動量に比べて小さいと仮定されていることを考慮して，$p \approx p'$ とおこう．このようにして，衝突前に原子が静止している座標系では，断面積に対して次のような公式を得る．

$$d\sigma_n=\frac{M^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\iint Ue^{-iqr}\psi_n^*\psi_0\,d\tau\,dV\right|^2 do. \qquad (150.2)$$

---

1) 陽電子と水素原子の衝突に対しては交換効果はない．そして全制動は単に (149.14) で ε_1 のかわりに $\varepsilon_{max}=E=v^2/2$ を代入することによって得られる：$\kappa=\frac{4\pi}{v^2}\log\frac{v^2}{0.55}$.

粒子の電荷が電子の電荷と異なることを考慮して，e^2 の代わりに ze^2 とおこう．ここで ze は入射粒子の電荷である．(148.9) の形に書かれた，非弾性散乱に対する一般式は

$$d\sigma_n = 8\pi\left(\frac{ze^2}{\hbar v}\right)^2 |\langle n|\sum_a e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_a}|0\rangle|^2 \frac{dq}{q^3} \tag{150.3}$$

であり，粒子の質量を含まない．これから次のことがでてくる；この式から得られるすべての公式は，もしもそれらの公式が v と q を使ってあらわれさえすれば，重粒子の衝突に対しても適用可能である．

上の公式を散乱角 ϑ（原子と衝突する重い粒子の曲げられる角度）を使ってあらわすのに，どのように変形すべきかは容易にわかる．このために，あらかじめ重い粒子の非弾性衝突では角度 ϑ がいつも小さいことに注意しよう．実際に，（原子内電子の運動量に比べて）運動量移動が大きいときには，原子との非弾性衝突を，自由電子との弾性衝突とみなすことができる；しかしながら，重い粒子と軽い粒子（電子）との衝突の際には，重い粒子はほとんど曲げられない．いいかえれば，重い粒子から原子への運動量移動は，粒子の始めの運動量に比べて小さい（例外は大きい角度の弾性散乱である．しかしながら，この確率はひじょうに小さい）．

このようにして，全角度領域で

$$q = \frac{1}{\hbar}\sqrt{\left(\frac{E_n - E_0}{v}\right)^2 + (Mv\vartheta)^2} \tag{150.4}$$

と置くことができる（これは事実上，いたるところで

$$q\hbar \approx Mv\vartheta \tag{150.5}$$

ということになり，例外はひじょうに小さい角度だけである）．他方，電子と原子との衝突を考察して，われわれは（小さい角度に対して）

$$q = \frac{1}{\hbar}\sqrt{\left(\frac{E_n - E_0}{v}\right)^2 + (mv\vartheta)^2}$$

と書いてきた．二つの式を比べると，次のように結論できる．電子と原子の衝突に対して得られた公式は，速度と散乱角であらわされているが，次の置きかえによって重い粒子の衝突に対する公式に移される．それはいたるところで（立体角要素 $do = 2\pi \sin\vartheta d\vartheta \approx 2\pi\vartheta d\vartheta$ も含めて），飛来する粒子の速度 v を変えないで，

$$\vartheta \longrightarrow \frac{M}{m}\vartheta \qquad (150.6)$$

とする．定性的には，これは小さい角の散乱の全図形が（与えられた速度のときに）m/M の比で縮めることを意味している．

得られた法則はまた，小さい角の弾性散乱に対してもあてはまる．$\vartheta \ll 1$ のときの公式 (139.4) に変換 (150.6) を行なって，断面積を得る：

$$d\sigma_e = 8\pi\left(\frac{ze^2}{Mv^2}\right)^2\left[Z - F\left(\frac{Mv\vartheta}{\hbar}\right)\right]^2\frac{d\vartheta}{\vartheta^3}. \qquad (150.7)$$

$\vartheta \sim 1$ の角度での重い粒子の弾性散乱に関しては，原子核によるラザフォード散乱に帰する．

運動量移動が大きいときの，原子の電離を伴う非弾性散乱は特別の考察を要求する．電子による電離のときの考察と違って，ここではもちろん交換効果はない．重粒子に対しては，運動量移動が大きいこと ($qa_0 \gg 1$) は，けっして大きい散乱角を意味しないのが特徴である；ϑ はいつも小さい．ε と $\varepsilon + d\varepsilon$ の間のエネルギーをもつ電子を放出する電離に対する断面積は，次の形に書かれた公式 (148.25) から直接に得られる：

$$d\sigma_r = 8\pi\left(\frac{ze^2}{\hbar v}\right)^2 Z\frac{dq}{q^3}.$$

ここで $\hbar^2 q^2/2m = \varepsilon$ と置く（運動量 $\hbar \boldsymbol{q}$ はすべて一つの原子内電子に与えられる）．その結果，

$$d\sigma_\varepsilon = \frac{2\pi Z z^2 e^4}{mv^2}\frac{d\varepsilon}{\varepsilon^2} \qquad (150.8)$$

を得る．

重い粒子と原子の衝突の際に特別に興味があるのは，全有効断面積および全有効制動である．非弾性散乱の全断面積は前の公式 (148.26) によって与えられる．全有効制動は (149.12) で q_1 のかわりに可能な最大運動量移動 $q_{\max}$ を代入して得られる．これはつぎのようにして容易に粒子の速度を使ってあらわすことができる．粒子の始めの運動量 Mv に比べて $\hbar q_{\max}$ はまったく小さいので，粒子のエネルギーの変化は，関係式 $\Delta E = \boldsymbol{v}\cdot\hbar\boldsymbol{q}$ によって運動量の変化と結ばれる．他方，運動量移動が大きいときには，このエネルギーはすべて主として一つの原子内電子に与えられる．したがって

$$\varepsilon=\frac{\hbar^2 q^2}{2m}=\hbar vq\leqq\hbar vq$$

と書くことができる．これから $\hbar q\leqq 2mv$，すなわち

$$\hbar q_{\max}=2mv, \qquad \varepsilon_{\max}=2mv^2 \tag{150.9}$$

となる．非弾性散乱の際の粒子の最大散乱角は

$$\vartheta_{\max}=\frac{\hbar q_{\max}}{Mv}=\frac{2m}{M}$$

であることを指摘しよう．

(149.12) に (150.9) を代入して，重い粒子の全有効制動を得る：

$$\kappa=\frac{4\pi Zz^2e^4}{mv^2}\log\frac{2mv^2}{I}. \tag{150.10}$$

§ 151. 中性子の散乱

散乱理論の一連の物理的問題で，われわれは散乱中心の固有運動が散乱過程に与える影響を明らかにする必要性に遭遇する．もちろん各中心そのものによる散乱には摂動論を使うことができないけれども，ある一定の条件下では，この問題の解にフェルミ (1936) によって発展させられた特殊の摂動論を使うことができることがわかった．とくに，遅い中性子の原子系，たとえば分子による散乱の問題はこの種の問題である．問題を限定してこの問題について以下述べることにする．

電子は実際上中性子を散乱しない．したがってすべての散乱は原子核で起こる[1]．われわれは，個々の核による散乱振幅が原子間距離に比べて小さいと考えよう．そのとき，分子内の一つの原子核で散乱された波の振幅は，他の原子核の存在する点ではもう小さくなっている．この条件を満足するとき，分子による散乱振幅は個々の原子核による散乱振幅の和で与えられる．

一般に，中性子と原子核との衝突には摂動論は使えない．核力の作用半径は小さいけれども，その半径の端でも力はひじょうに強いからである．重要なことは，遅い中性子（中性子の波長は原子核の大きさに比べて大きい）の散乱振幅は，速度に依存しないある定数になることである．f_a を a 番目の核による散

1) 分子はまた磁気モーメントを持たないと考えよう．そうでない場合は，さらに中性子と分子の磁気モーメントの相互作用による散乱の特殊効果がある．

乱振幅としよう．そうすると $|f_a|^2do$ は自由な核による中性子の弾性散乱の（重心系における）微分断面積である．もしも中性子と原子核の相互作用を《点状》ポテンシャル・エネルギー

$$U(\boldsymbol{r})=-\frac{2\pi\hbar^2}{M}f\delta(\boldsymbol{r}) \tag{151.1}$$

で記述すれば，一定値の振幅を摂動論から形式的に求めることができる．ここで M は，中性子と原子核の換算質量である．この式をボルンの公式（126.4）に代入すると，δ–関数のために積分は $\boldsymbol{q}$ に依存しない一定値になる．このように定義された《場》$U(\boldsymbol{r})$ を**擬ポテンシャル**と呼ぶ．もちろん，これを導入できるのは f が一定であることによることを強調しよう．中性子のエネルギーが任意である一般の場合，散乱振幅は始めおよび終りの運動量 $\boldsymbol{p}$ および $\boldsymbol{p}'$ に別々に依存し，それらの差 $\boldsymbol{q}$ だけに依存するわけではない．しかしながら，ボルン近似で計算された振幅は $\boldsymbol{q}$ だけに依存することができる[1]．

もしも散乱する核が与えられた運動（たとえば，分子内の振動）を行なっていてこの運動で平均すると，相互作用（151.1）は，散乱振幅 f に比べて一般に大きい領域で《ならされる》．このように《ならされた》相互作用はボルン近似の適用条件（126.1）を満足する．

このようにして，中性子と分子の相互作用を，ポテンシャル・エネルギー

$$U(\boldsymbol{r})=-2\pi\hbar^2\sum_a\frac{f_a}{M_a}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_a) \tag{151.2}$$

で記述しよう．ここで和は分子内のすべての原子核について行なわれる．$\boldsymbol{R}_a$ はその動径ベクトルで，$\boldsymbol{r}$ は中性子の動径ベクトルである．この式を公式（148.3）に代入すると（ここで m としては M_{M} をとる．ここで M_{M} は分子と中性子の換算質量である），分子による中性子の重心系での散乱断面積として，次のような式を得る：

$$d\sigma_n=M_{\text{M}}^2\frac{p'}{p}\left|\sum_a\frac{f_a}{M_a}\langle n|e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{R}_a}|0\rangle\right|^2do. \tag{151.3}$$

1）擬ポテンシャルは，形式的に摂動論を適用したときに，散乱振幅の正しい値を与えるけれども，これは決して，このような場に摂動論が実際に適用可能であることを意味するものではないことを強調しよう．逆に深さ U_0 のポテンシャルの井戸で，$U_0a^3=\text{const}$（a は井戸の半径でゼロに近づく）の法則で深さが無限大になるものに対しては，条件（126.1），（126.2）はもちろん満足されない．

行列要素は原子核の運動のエネルギー E_0 および E_n をもつ定常状態の波動関数からつくり，運動量 p および p' はエネルギー保存則

$$\frac{p^2-p'^2}{2M_M}=E_n-E_0$$

によって互いに結ばれている．

公式 (151.3) は分子内の原子核の運動状態のある変化（遷移 $0\to n$）を伴う非弾性衝突を記述する．これは提起された問題の解である．すなわち，この公式により自由な原子核による中性子の散乱振幅（既知と仮定される）を使って，原子核の固有運動を考慮に入れ，異なる原子核の散乱からの干渉の効果を考慮に入れた分子による散乱断面積が決定される．

もしも原子核がゼロと異なるスピンをもてば，散乱振幅 f_a は散乱する核と中性子の全スピンに依存することを，上記の公式中に考慮しなければならない．これは次のようにして行なわれる．

核と中性子のスピンの和は二つの値をとることができる．すなわち $j_a=i_a\pm 1/2$ である．これに対応する散乱振幅を f_a^+ および f_a^- としよう．スピンの和が一定値 j_a のときに，固有値がそれぞれ f_a^+ および f_a^- になるようなスピン演算子をつくろう．

$$\hat{f}_a=a_a+b_a\hat{\boldsymbol{s}}\hat{\boldsymbol{i}}_a \qquad (151.4)$$

がこのようなものである．ここで $\hat{\boldsymbol{i}}_a$ と $\hat{\boldsymbol{s}}$ は核および中性子のスピン演算子で，係数 a_a および b_a は式

$$a_a=\frac{1}{2i_a+1}[(i_a+1)f_a^++i_af_a^-],\qquad b_a=\frac{2}{2i_a+1}(f_a^+-f_a^-) \qquad (151.5)$$

によって与えられる．与えられた j の値に対して，演算子 $\hat{\boldsymbol{i}}\hat{\boldsymbol{s}}$ の固有値が

$$\boldsymbol{si}=\frac{1}{2}\left[j(j+1)-i(i+1)-\frac{3}{4}\right]$$

であることに気づけば，上記のことは容易に確かめられる．

演算子 (151.4) は考えている遷移に対応する行列要素をとり，公式 (151.3) の f_a のかわりに代入する必要がある．もしも入射中性子束と標的核が偏らないならば，散乱断面積は適当な方法で平均される必要がある．

問 題

1. 中性子と核のスピンの方向が完全に無秩序な分布であると仮定して，公式(151.3)の平均を行なえ．分子のすべての核は異なるとする．

解 中性子と核のスピンの方向についての平均は独立である．このどちらのスピンも平均するとゼロとなる．したがって $\overline{\boldsymbol{s}\boldsymbol{i}_a}=0$ である．もしも分子が同一の原子を含まなければ，核スピンの交換相互作用はない．核スピンの直接の相互作用が無視できるほど小さいために，分子内の別々の原子核のスピンの方向は独立であると考えてよい．したがって，$(\boldsymbol{s}\boldsymbol{i}_1)(\boldsymbol{s}\boldsymbol{i}_2)$ の形の積もまた平均するとゼロになる．ところが平方 $(\boldsymbol{s}\boldsymbol{i})^2$ に対しては

$$\overline{(\boldsymbol{s}\boldsymbol{i})^2}=\frac{1}{3}\boldsymbol{s}^2\boldsymbol{i}^2=\frac{s(s+1)i(i+1)}{3}=\frac{i(i+1)}{4}$$

が成立する．その結果，平均された断面積に対して，次式を得る：

$$d\sigma_n=M_{\mathrm{M}}^2\frac{p'}{p}\left\{\left|\sum_a\frac{a_a}{M_a}\langle n|e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{R}_a}|0\rangle\right|^2+\frac{1}{4}\sum_a\frac{i_a(i_a+1)}{M_a^2}b_a^2|\langle n|e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{R}_a}|0\rangle|^2\right\}do.$$

2. パラおよびオルソ水素によるおそい中性子の散乱に，公式(151.3)を適用せよ(J. Schwinger, E. Teller, 1937).

解 スピン演算子の行列要素の計算まで行なうと，H_2 分子による散乱に対する式(151.3)は

$$d\sigma_n=\frac{16p'}{9p}|a\langle n|e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}/2}+e^{i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}/2}|0\rangle+b\hat{\boldsymbol{s}}\langle n|\hat{\boldsymbol{i}}_1e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}/2}+\hat{\boldsymbol{i}}_2e^{i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}/2}|0\rangle|^2do,$$
$$a=\frac{1}{4}(3f^++f^-),\qquad b=f^+-f^- \tag{1}$$

の形になる($\pm\boldsymbol{r}/2$ は分子内の二つの核の，その重心に対する動径ベクトルである).

分子の回転および振動状態は，量子数 K, M_K, v によって与えられる(これらの全体を(1)の中の $\boldsymbol{n}$ と考える必要がある). H_2 分子の基底電子状態で，K の偶数値が可能なのは全核スピン $I=0$ のときだけであり(パラ水素)，奇の K が可能なのは $I=1$ のときだけである(オルソ水素)(§86 参照)．したがって，次の二つの場合を区別する必要がある：1) 同じ偶奇性の K の値をもつ回転状態間の遷移は，I の変化のない(オルソ－オルソおよびパラ－パラ遷移の)ときにのみ可能である；2) 異なる偶奇数の K の値をもつ状態間の遷移は，I の変化のある(オルソ－パラおよびパラ－オルソ遷移の)ときにのみ可能である．

第一の場合には

$$\langle n|e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}/2}|0\rangle=\langle n|e^{i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}/2}|0\rangle=\left\langle n\left|\cos\frac{\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}}{2}\right|0\right\rangle$$

となる(回転波動関数は $\boldsymbol{r}$ の符号を変えると $(-1)^K$ が掛けられることを思い起こす必要がある)．(1)の中のスピン演算子はこのとき $2a+b\hat{\boldsymbol{s}}\hat{\boldsymbol{I}}$ となる．ここで $\hat{\boldsymbol{I}}=\hat{\boldsymbol{i}}_1+\hat{\boldsymbol{i}}_2$ である．この演算子は上に述べたことにより，I について対角形である．自乗 $(2a+b\boldsymbol{s}\boldsymbol{I})^2$ は問題1のようにして平均され，

$$4a^2+\frac{b^2}{4}I(I+1)$$

となる．その結果

$$d\sigma_n=\frac{4p'}{9p}\left|\left\langle n\left|\cos\frac{\boldsymbol{qr}}{2}\right|0\right\rangle^2\{(3f^+ + f^-)^2+I(I+1)(f^+ - f^-)^2\}do\right. \qquad (2)$$

を得る．

二番目の場合には

$$\langle n|e^{i\boldsymbol{qr}/2}|0\rangle=-\langle n|e^{-i\boldsymbol{qr}/2}|0\rangle=i\left\langle n\left|\sin\frac{\boldsymbol{qr}}{2}\right|0\right\rangle$$

である．そして (1) の中のスピン演算子は $\hat{\boldsymbol{s}}(\hat{\boldsymbol{i}}_1-\hat{\boldsymbol{i}}_2)$ となる．これは I について非対角形の行列要素だけをもっている．この行列要素の絶対値の自乗を，終状態における全スピン $\boldsymbol{I}'$ の可能なすべての投影値について和をとったものは，自乗 $(\boldsymbol{s},\ \boldsymbol{i}_1-\boldsymbol{i}_2)^2$ の平均値（対角要素）として計算される（698頁の脚注参照）．それは

$$\overline{(\boldsymbol{s},\ \boldsymbol{i}_1-\boldsymbol{i}_2)^2}=\frac{1}{3}\ \frac{3}{4}\overline{(\boldsymbol{i}_1-\boldsymbol{i}_2)^2}=\frac{1}{4}(2\boldsymbol{i}_1^2+2\boldsymbol{i}_2^2-\boldsymbol{I}^2)=\frac{1}{4}[3-I(I+1)]$$

に等しい．その結果

$$d\sigma_n=(1)(3)\frac{4p'}{9p}\left|\left\langle n\left|\sin\frac{\boldsymbol{qr}}{2}\right|0\right\rangle\right|^2(f^+ - f^-)^2do \qquad (3)$$

を得る．ここで係数 (1) はオルソ－パラ遷移に，係数 (3) はパラ－オルソ遷移に対するものである．

もしも中性子が十分におそく，その波長がまた分子の大きさに比べても大きければ，(2) および (3) のなかの行列要素では $\cos(\boldsymbol{qr}/2)=1$，$\sin(\boldsymbol{qr}/2)=0$ と置くことができ，この結果，(2) の中の対角要素 00 を除いて，これらすべてはゼロになる．当然のことながら，これらの条件の下では弾性散乱のみが可能である．この場合に弾性散乱の断面積は

$$d\sigma_e=\frac{4}{9}[(3f^+ + f^-)^2+I(I+1)(f^+ - f^-)^2]do$$

である．

3.　振動数 ω をもつ 3 次元等方振動子とみなされる束縛陽子による中性子散乱の断面積を決定せよ（E. Fermi, 1936）．

解　空間に固定した点の周囲を陽子が振動するものと考えると，公式 (151.3) では，その導き方の意味に従って $M_M=M$ および $M_a=M/2$（M は陽子の質量）と置く必要がある．すると，

$$d\sigma_n=\frac{p'}{p}\ \frac{\sigma_0}{\pi}\ \sum\left|\int e^{-i\boldsymbol{qr}}\psi_{000}(\boldsymbol{r})\psi_{n_1n_2n_3}(\boldsymbol{r})dV\right|^2do$$

である．ここで $\sigma_0=4\pi|f|^2$ は自由陽子による散乱断面積である．そして $\psi_{n_1n_2n_3}$ は固有値 $E_n=\hbar\omega(n+3/2)$ に対応する 3 次元振動子の固有関数である．この和は，与えられた和 $n_1+n_2+n_3=n$ をもつ n_1, n_2, n_3 のすべての値に対して行なわれる．関数 $\psi_{n_1n_2n_3}$ は，

三つの1次元振動子の波動関数の積であらわされる（§33，問題4参照）．したがって，われわれに必要な積分は

$$\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(\frac{-iq_x x}{2}-\frac{\alpha^2x^2}{2}-\frac{\alpha^2x^2}{2}\right)H_{n_1}(\alpha x)dx$$

の形の三つの積分の積に分解される（$\alpha=\sqrt{M\omega/\hbar}$ である）．この積分は，$H_{n_1}(x)$ に (a.4) の形を代入し，n_1 回の部分積分をすることにより計算される．その結果

$$d\sigma_n=\frac{1}{\pi}\frac{v'}{v}\frac{\sigma_0}{2^n\alpha^{2n}}\sum\frac{q_x^{2n_1}q_y^{2n_2}q_z^{2n_3}}{n_1!n_2!n_3!}\exp\left(-\frac{q^2}{2\alpha^2}\right)do$$

を得る．和は2項定理に従って行なわれ，最終的に

$$d\sigma_n=\frac{\sigma_0}{\pi n!}\sqrt{\frac{E'}{E}}\left(\frac{q^2}{2\alpha^2}\right)^n\exp\left(-\frac{q^2}{2\alpha^2}\right)do$$

を得る．とくに，弾性散乱の断面積（$n=0$，$E=E'$）は

$$d\sigma_e=\frac{\sigma_0}{\pi}\exp\left(-\frac{q^2}{2\alpha^2}\right)do,\qquad \sigma_e=\sigma_0\frac{\hbar\omega}{E}\left[1-\exp\left(-\frac{4E}{\hbar\omega}\right)\right]$$

である．$E/\hbar\omega\to0$ のとき，$\sigma_e\to4\sigma_0$ である．

§ 152. 高エネルギーの非弾性散乱

2粒子の散乱問題に§131で使われたアイコナール近似は，高速粒子と粒子系すなわち《標的》との衝突の際の過程（その中には非弾性散乱も含む）も包含するように一般化することができる（R. J. Glauber, 1958）．

この一般化での基本的な仮定は前のままである．入射粒子のエネルギーEは十分大きくて$E\gg U$でかつ$ka\gg1$と仮定する．ここでUは粒子と標的の相互作用のエネルギーで，aはその相互作用の半径である．運動量の移動が比較的小さい散乱を考察する．すなわち，入射粒子の運動量の変化$\hbar\boldsymbol{q}$がその始めの運動量$\hbar\boldsymbol{k}$にくらべて小さい：$q\ll k$である．しかしながらこの条件で今は，散乱角が小さいだけでなく，与えられるエネルギーも相対的に小さいことも意味している．

このほかに，入射粒子の速度vは，標的内の粒子の速度v_0に比べて大きいと考える．すなわち

$$v\gg v_0. \tag{152.1}$$

荷電粒子の原子による散乱に対しては，この条件はボルン近似の適用可能性（§148，§150参照）と同等である．すなわち，$v\gg v_0$から自動的に$|U|a/\hbar v\ll1$が出る．したがって，ここで展開されるような理論の必要は一般には生じな

い．しかしながら，粒子がクーロン力でなく核力で結合されている原子核の標的に対しては別の事情が生じる．以下，ことがらを限定して，原子核による高速粒子の散乱について述べよう[1]．

条件 (152.1) は，原子核内の核子の位置が与えられたときの入射粒子の運動の考察を可能にする[2]．言いかえれば，粒子＋標的系の波動関数は次の形にあらわされる：

$$\psi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \cdots)=\varphi(\boldsymbol{r};\ \boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \cdots)\Phi_i(\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \cdots). \qquad (152.2)$$

ここで $\Phi_i(\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \cdots)$ は原子核のある（i 番目の）内部状態の波動関数である（$\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \cdots$ はその中の核子の動径ベクトルである）．因子 $\varphi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \cdots)$ は，$\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \cdots$ の値が与えられたときの散乱される粒子（$\boldsymbol{r}$ はその動径ベクトル）の波動関数である．$\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \cdots$ はシュレーディンガー方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+\sum_a U_a(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_a)\right]\varphi=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\varphi \qquad (152.3)$$

の中ではパラメータの役割を果たしている．ここでは $U_a(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_a)$ は a 番目の核子と粒子との相互作用のエネルギー，$\hbar\boldsymbol{k}$ は無限遠における粒子の運動量である[3]．

もしもわれわれが漸近形

$$\varphi=e^{ikr}+F(\boldsymbol{n}', \boldsymbol{n};\ \boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \cdots)\frac{e^{ikr}}{r} \qquad (152.4)$$

($\boldsymbol{n}'=\boldsymbol{r}/r,\ \boldsymbol{n}=\boldsymbol{k}/k$) の形をした，方程式 (152.3) の解を求めるならば，波動関数 (152.2)

$$\psi=e^{ikr}\Phi_i+F\Phi_i\frac{e^{ikr}}{r} \qquad (152.5)$$

は，（衝突前に）その i 番目の状態にあった原子核による散乱を記述する．すなわち，入射波 e^{ikr} は Φ_i との積として (152.5) に含まれている．(152.5) の第2項は散乱波をあらわす．しかしながら，この式は，入射粒子のエネルギーの

---

1) 少し重い原子核に対しては，条件 (152.1) は相対論的速度 v になる．この節では非相対論の枠組で形式的方法を記述し，あれこれの具体的散乱過程への実際の応用可能性の問題には触れないことにしよう．

2) このような近似は，分子論の基礎にあるものと似ている．そこでは原子核の配置が与えられたときの電子状態が考察された．

3) (152.3)では，粒子と原子核との相互作用は，それと個々の核子との2体の相互作用の和であると仮定されている．

変化が十分に小さく，すなわち原子核の内部エネルギーの変化が小さい条件の下でのみ使うことができる．《しっかりと固定された》核子の作る一定の場の中での粒子の運動（それは方程式 (152.3) に対応する）を考察しよう．これによりわれわれは，この運動のエネルギーが変化する可能性を無視する．

原子核の内部状態のある一定の変化を伴う散乱振幅をとりだすために，ψ を次の形にあらわす必要がある：

$$\psi = e^{ikr}\Phi_i + \sum_f f_{fi}(\boldsymbol{n}', \boldsymbol{n})\Phi_f \frac{e^{ikr}}{r}. \qquad (152.6)$$

ここで和は原子核の種々の状態について行なわれる．したがって，$f_{fi}(\boldsymbol{n}', \boldsymbol{n})$ は，与えられた原子核の遷移 $i \to f$ を伴う求める散乱振幅を与える．これは散乱角（$\boldsymbol{n}$ と $\boldsymbol{n}'$ の間の角）の関数として与えられる．(152.6) を (152.5) とくらべて，

$$f_{fi}(\boldsymbol{n}', \boldsymbol{n}) = \int \Phi_f^* F \Phi_i d\tau \qquad (152.7)$$

を得る．ここで $d\tau = d^3R_1 d^3R_2 \cdots$ は原子核の位相空間の体積要素である．この公式が状態 i および f のエネルギーの差が比較的小さいときにのみ適用可能であることを，ふたたび強調しておこう．

方程式 (152.3) の解 (152.4) そのものは，§ 131 に記述された方法によって求められる[1]．(131.7) と同様に

$$F(\boldsymbol{n}', \boldsymbol{n}; \boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \cdots) = \frac{k}{2\pi i}\int [S(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \cdots) - 1] \exp(-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{\rho}) d^2\rho. \qquad (152.8)$$

を得る．ここで記号

$$\begin{aligned} S(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \cdots) &= \exp[2i\delta(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \cdots)], \\ \delta(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \cdots) &= \sum_a \delta_a(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{R}_{a\perp}), \\ \delta_a(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{R}_{a\perp}) &= -\frac{1}{2\hbar v}\int_{-\infty}^{\infty} U_a(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_a) dz \end{aligned} \qquad (152.9)$$

が導入された．$\boldsymbol{\rho}$ は動径ベクトル $\boldsymbol{r}$ の $\boldsymbol{k}$ に垂直な xy 面への投影（$\boldsymbol{R}_{a\perp}$ は動径

---

1) § 131 では，波動関数の出発の式 (131.4) は距離が $z \ll ka^2$ のときに対してのみ使用可能であることが指摘されている．しかしこの事情は § 131 のそれからさきの演繹では重要ではなかった．しかし粒子系（原子核）による散乱の際にはこれは付加的制限条件になってしまう．散乱する系の全体積にわたって式 (131.4) が使用可能であることが必要である．すなわち $R_0 \ll ka^2$ でなければならない．ここで R_0 は原子核の半径である（また a はポテンシャル U の作用半径である）．

ベクトル $\boldsymbol{R}_a$ の同じような投影）である． $\hbar\boldsymbol{q}=\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}$ は散乱される粒子の運動量の変化であるが，(152.8) の中にはその横成分のみが現われる．関数 δ_a は次式によって個々の自由核子による粒子の散乱振幅を定義する：

$$f^{(a)}=\frac{k}{2\pi i}\int\{\exp[2i\delta_a(\boldsymbol{\rho})]-1\}\exp(-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{\rho})d^2\rho. \qquad (152.10)$$

$i=f$ のとき (152.7)，(152.8) から原子核による弾性散乱振幅が見いだされる．

$$f_{ii}(\boldsymbol{n}',\boldsymbol{n})=\frac{k}{2\pi i}\int[\bar{S}(\boldsymbol{\rho})-1]\exp(-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{\rho})d^2\rho. \qquad (152.11)$$

ここで横線は原子核の内部状態による平均である．すなわち，

$$\bar{S}(\boldsymbol{\rho})=\int S(\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{R}_1,\boldsymbol{R}_2,\cdots)|\Phi_i(\boldsymbol{R}_1,\boldsymbol{R}_2,\cdots)|^2d\tau. \qquad (152.12)$$

この公式は以前の式 (131.7) の一般化である．

(152.11) で $\boldsymbol{n}'=\boldsymbol{n}$ と置き光学定理 (142.10) を使って，散乱の全断面積を得る：

$$\sigma_t=2\int(1-\mathrm{Re}\,\bar{S})d^2\rho. \qquad (152.13)$$

弾性散乱の積分断面積 σ_e は $\boldsymbol{n}'$ の方向について $|f_{ii}|^2$ を積分することにより得られる．散乱角が小さいとき $q\approx k\theta$ で立体角要素は $do\approx d^2q/k^2$ である．したがって

$$\sigma_e=\int|f_{ii}|^2\frac{d^2q}{k^2}.$$

(152.11) からの f_{ii} を使って $f_{ii}^*f_{ii}$ を（$d^2\rho d^2\rho'$ についての）2重積分の形にあらわして，公式

$$\int\exp[-i\boldsymbol{q}(\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\rho}')]d^2q=(2\pi)^2\delta(\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\rho}')$$

を使って d^2q について積分する．その後に $d^2\rho'$ についての積分により δ-関数は落ちてしまう．結果として

$$\sigma_e=\int|\bar{S}-1|^2d^2\rho \qquad (152.14)$$

を得る．最後に全反応断面積は

$$\sigma_r=\sigma_t-\sigma_e=\int(1-|\bar{S}|^2)d^2\rho. \qquad (152.15)$$

式 (152.13)-(152.15) と，一般公式 (142.3)-(142.5) との対応に注目しよう．

後者の中で，（l の大きいところの）和を（$\rho=l/k$ として）$d^2\rho$ による積分に移って，S_l を関数 $\bar{S}(\boldsymbol{\rho})$ にかえて，(152.13)-(152.15) を得る.

問　　題

1. 高速粒子の重陽子による弾性散乱振幅を，陽子および中性子による散乱振幅を使ってあらわせ (R. J. Glauber, 1955).

解 (152.11) に従って重陽子による弾性散乱振幅は

$$f^{(d)}(\boldsymbol{q})=\frac{k}{2\pi i}\int|\psi_d(\boldsymbol{R})|^2\left\{\exp\left[2i\delta_n\left(\boldsymbol{\rho}-\frac{\boldsymbol{R}_\perp}{2}\right)+2i\delta_p\left(\boldsymbol{\rho}+\frac{\boldsymbol{R}_\perp}{2}\right)\right]-1\right\}\exp(-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{\rho})d^3Rd^2\rho. \tag{1}$$

ここで $\psi_d(\boldsymbol{R})$ は重陽子中の中性子 (n) と陽子 (p) の相対運動の波動関数である．したがって，$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{R}_n-\boldsymbol{R}_p$ で，$\boldsymbol{R}_\perp$ は入射粒子の波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ に垂直な面への $\boldsymbol{R}$ の投影である．(1) の波括弧の中にあらわれる差を次の形にあらわそう：

$$\exp(2i\delta_n+2i\delta_p)-1=(e^{2i\delta_n}-1)+(e^{2i\delta_p}-1)+(e^{2i\delta_n}-1)(e^{2i\delta_p}-1).$$

このあとで，(152.10) とその逆の公式にしたがって，

$$\exp[2i\delta_a(\boldsymbol{\rho})]-1=\frac{2\pi i}{k}\int f^{(a)}(\boldsymbol{q})e^{i\boldsymbol{q}\boldsymbol{r}}\frac{d^2q}{(2\pi)^2}$$

となる．中性子の散乱振幅 ($f^{(n)}$) と陽子の散乱振幅 ($f^{(p)}$) の定義を考慮して積分は変形される．結果として

$$f^{(d)}(\boldsymbol{q})=f^{(n)}(\boldsymbol{q})F(\boldsymbol{q})+f^{(p)}(\boldsymbol{q})F(-\boldsymbol{q})-\frac{1}{2\pi ik}\int F(2\boldsymbol{q}')f^{(n)}\left(\frac{\boldsymbol{q}}{2}+\boldsymbol{q}'\right)f^{(p)}\left(\frac{\boldsymbol{q}}{2}-\boldsymbol{q}'\right)d^2q' \tag{2}$$

を得る．ここで

$$F(\boldsymbol{q})=\int|\psi_d(\boldsymbol{R})|^2e^{-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{R}/2}d^3R$$

は重陽子の形状因子である．

(2) で $\boldsymbol{q}=0$ とおき（このとき $F(0)=1$），光学定理 (142.10) を使って，重陽子による散乱の全断面積を得る．すなわち

$$\sigma_t^{(d)}=\sigma_t^{(n)}+\sigma_t^{(p)}+\frac{2}{k^2}\operatorname{Re}\int F(2\boldsymbol{q})f^{(n)}(\boldsymbol{q})f^{(p)}(-\boldsymbol{q})d^2q \tag{3}$$

である．

2. 重い吸収性の原子核による散乱の際に，高速重陽子が独立な中性子および陽子に崩壊する断面積を決定せよ．原子核の半径 R_0 は重陽子の波長にくらべて大きく ($kR_0\gg1$, $\hbar\boldsymbol{k}$ は重陽子の運動量である) また重陽子の半径に比べても大きい（イェ・エリ・ファインベルク Е. Л. Фейнберг, 1954; R. J. Glauber, 1955; ア・イ・アヒエゼル А. И. Ахиезер およびア・ゲ・シテンコ А. Г. Ситенко, 1955).

解 入射重陽子平面波に対して，大きい ($kR_0\gg1$) 吸収性原子核は，そこで波の回折を生じさせる不透明な衝立の役割を果たす．入射重陽子の波動関数は $e^{ikr}\psi_d(R)$ である．

ここで $\psi_d(R)$ は重陽子の内部波動関数である（$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{R}_n-\boldsymbol{R}_p$ は重陽子内の中性子と陽子の間の動径ベクトルである．$\boldsymbol{r}=(\boldsymbol{R}_n+\boldsymbol{R}_p)/2$ はその重心運動の動径ベクトルである）．吸収性の原子核の存在はこの関数に，中性子および陽子の横座標（$\boldsymbol{\rho}_n$ および $\boldsymbol{\rho}_p$）が原子核の《影》の領域すなわち半径 R_0 の円の内部に対応する部分の《食》をもたらす．言いかえれば，波動関数は

$$\psi=e^{ikr}S(\boldsymbol{\rho}_n,\boldsymbol{\rho}_p)\psi_d(R)$$

に等しくなる．ここで $\rho_n,\rho_p\geqslant R_0$ では $S=1$，またもしも ρ_n あるいは ρ_p の一つでも R_0 より小さければ $S=0$ である[1]．この関数は（因子 ψ_d なしで）(131.5) の形の入射波の式に対応する（そこでは回折で曲げられた光は除かれている）．したがって，因子 S は §131，§152 におけるとまったく同じ意味をもっている．

(152.13) と (152.14) と同様に，重陽子の散乱の全断面積 σ_t（すべての非弾性過程を含む）と弾性散乱の断面積 σ_e は公式

$$\sigma_t=2\int(1-\overline{S})d^2\rho,\qquad \sigma_e=\int(\overline{S}-1)^2d^2\rho$$

によって与えられる．ここで $\boldsymbol{\rho}=(\boldsymbol{\rho}_n+\boldsymbol{\rho}_p)/2$ であり，S が実数であることを考慮に入れた．S の平均は重陽子の基底状態について行なわれ

$$\overline{S}(\rho)=\int S\psi_d^2d^3R$$

である．ψ_d としては関数

$$\psi_d=\sqrt{\frac{\kappa}{2\pi}}\frac{e^{-\kappa R}}{R}$$

をとれば十分である．これは中性子と陽子の間に働く核力の作用半径外の距離 R に対して正しい（(133.14) 参照．$\kappa=\sqrt{m|\varepsilon|}/\hbar$ である．ここで $|\varepsilon|$ は重陽子の結合エネルギーである．m は核子の質量である）．S の定義に従って，差 $1-S$ は，もしも2個の核子の中の一つあるいは両方が半径 R_0 の円内にきて，原子核に吸収されればゼロと異なる．したがって

$$\sigma_{\text{cap}}=\int(1-\overline{S})d^2\rho=\frac{\sigma_t}{2}\tag{1}$$

は，一つあるいは両方の核子の捕獲断面積である．一方，$\sigma_t=\sigma_{\text{cap}}+\sigma_e+\sigma_{\text{dec}}$ である．ここで σ_{dec} はわれわれにとって興味がある重陽子の《回折》崩壊である．これから

$$\sigma_{\text{dec}}=\frac{1}{2}\sigma_t-\sigma_e=\int\overline{S}(1-\overline{S})d^2\rho\tag{2}$$

である．

$R_0\kappa\gg1$ のとき，積分 (2) では原子核の境界から小さい（$\sim1/\kappa$）の距離が重要である．このときこの境界に沿っての積分は $2\pi R_0$ を与える．それにまた垂直方向の積分は，あたかも影の部分が直線で限られているかのように，行なうことができる．この直線を y 軸

1）重陽子と原子核のクーロン相互作用は無視する．

として選んで（また x-軸は影から外の方向にとる）

$$\sigma_{\rm dec}=2\pi R_0\int_0^\infty \overline{S}(x)[1-\overline{S}(x)]dx$$

を得る．ここで積分

$$\overline{S}(x)=\iint_{-\infty}^{\infty}\int_{-2x}^{2x}\psi_d^2(R)dXdYdZ,\quad R=\sqrt{X^2+Y^2+Z^2}$$

は $x=(X_n+X_p)/2$ を与えたとき，$X_n, X_p\geqslant 0$ の領域で，あるいは同じことだが，$|X|=|X_n-X_p|\leqslant 2x$ の領域で行なわれる．積分は，変数 X, R および YZ 面内の極角とに移る（このとき $dYdZ\rightarrow 2\pi RdR$）ことにより，次の形になる

$$\overline{S}(x)=1-e^{-4\kappa x}+4\kappa x\int_{4\kappa x}^{\infty}\frac{e^{-\xi}}{\xi}d\xi \tag{3}$$

この関数 $\overline{S}(x)$ を使った積分 (2) は部分積分を繰り返し，公式

$$\int_0^\infty (e^{-\xi}-e^{-2\xi})\frac{d\xi}{\xi}=\log 2$$

を使って計算される．その結果

$$\sigma_{\rm dec}=\frac{\pi}{3\kappa}R_0\left(\log 2-\frac{1}{4}\right)$$

を得る[1)]．

1) $\kappa R_0\gg 1$ の条件では捕獲断面積は

$$\sigma_{\rm cap}=\pi R_0^2+\frac{\pi R_0}{4\kappa}$$

（積分 (1) は $\rho>R_0$ の領域で (3) を使って計算され，$\rho<R_0$ の領域では πR_0^2 を与える）．この断面積はその中に重陽子全体の捕獲も，また他の解放を伴う核子1個だけの捕獲（ストリッピング反応）も含んでいる．後者の断面積は，2核子中の一つだけが影の部分に入るような（ψ_d^2 によって平均された）直射の面積として計算され

$$\sigma_{{\rm cap}\,n}=\sigma_{{\rm cap}\,p}=\pi R_0/4\kappa$$

に等しい（R. Serber, 1947）．

人名総索引

(配列は五十音順. ①,②は第1巻, 第2巻を表す)

ア　行

カ　行

サ　行

タ 行

ナ 行

ハ 行

マ 行

ヤ 行

ラ　行

ワ　行

事項総索引

配列は電話帳順．①，②は第1巻，第2巻を表す．太字の数字は主要ページを示す．

ア　行

カ　　行

サ 行

タ　行

ナ　行

ハ　行

マ　行

ヤ　行

ラ　行

訳者あとがき

本書は先に出版された邦訳第1巻と併せて，ランダウ＝リフシッツ著，ピタエフスキー協力《量子力学――非相対論的理論》第3改訂増補版，ナウカ出版社，モスクワ，1974の全訳をなすもので，後半の第11〜18章が含まれている．

原著第3版が1974年に出版された直後，リフシッツ教授から訳者へ新版の見本が送られて来たが，訳者達の多忙のため，今日まで改訳が見送られてきたことを読者にお詫びしたい．幸い東京図書編集部の松本重彰氏およびスタッフの方々の熱心な御協力により，ようやく上梓の運びとなったことに感謝の意を表する次第である．

第3版の特徴については，すでに第1巻の「訳者あとがき」に述べたように，加筆，削除，改稿が随所に及んでおり，本文だけでも原著第2版の700頁から750頁へと増え，四つの新しい節（§110，130，141，152）が設けられた他，節の順序の変更も若干みられる．このことは著者の序言にもあるように，最新の研究成果ばかりでなく，最近注目をあびるようになった旧い研究成果をも大幅に取り入れたため，新しい題材がかなり追加されたからである．このようなわけで本書は初心者に対する入門書としてすぐれているばかりでなく，量子力学の新しい展開にとっても重要な役割を果たし得る内容を持っている．

また本書は全10巻から成るランダウ＝リフシッツ理論物理学教程の第Ⅲ巻に当てられており，他の巻との関連を十分に考慮されて執筆されているという特徴がある．本書の理解のためには，第Ⅰ巻《力学》，第Ⅱ巻《場の理論》がとりわけ重要であり，本書はまた第Ⅳ巻《量子電気力学》，第Ⅴ巻《統計物理学》，第Ⅹ巻《物理的運動学》の理解にとって重要である．これらはすべて邦訳が出版されているので，参考までに表にまとめておく．

翻訳に当っては，前半の第1巻と同じ精神で行ない，訳語の統一もはかった．リフシッツ教授から寄せられた誤植の訂正もすべて行なった．

拙訳が，もしも日本の物理学を学ぶ人々に，20世紀物理学の集大成でもあり，世界の物理学徒の共通財産でもある《理論物理学教程》をより身近なものとし，その簡明直截な精神と豊富な物理的内容を伝える一助になれば，訳者の喜びもまた格別である．

1983年 11月　　　　訳　者

ランダウ＝リフシッツ理論物理学教程（全10巻邦訳リスト）

第Ⅰ巻　力学〔邦訳：広重徹・水戸巌訳『力学（増訂第3版）』1974，東京図書〕

第Ⅱ巻　場の古典論〔邦訳：恒藤敏彦・広重徹訳『場の古典論（原書第6版）』1978，東京図書〕

第Ⅲ巻　量子力学（非相対論的理論）〔邦訳：佐々木健・好村滋洋・井上健男訳『量子力学（改訂新版）』（全2巻），1983，東京図書〕

第Ⅳ巻　量子電気力学（相対論的量子論）〔邦訳：井上健男訳『相対論的量子力学』（全2巻），1969，1972，東京図書〕

第Ⅴ巻　統計物理学・第1部〔邦訳：小林秋男・小川岩雄・富永五郎・浜田達二・横田伊佐秋訳『統計物理学（第3版）』（全2巻）1980，岩波書店〕

第Ⅵ巻　流体力学〔邦訳：竹内均訳『流体力学』（全2巻）1970，1971，東京図書〕

第Ⅶ巻　弾性理論〔邦訳：佐藤常三・石橋善弘訳『弾性理論（増補新版）』1989，東京図書〕

第Ⅷ巻　連続体の電気力学〔邦訳：井上健男・安河内昴・佐々木健訳『電磁気学』（全2巻）1962，1965，東京図書〕

第Ⅸ巻　統計物理学・第2部〔邦訳：碓井恒丸訳『量子統計物理学』1982，岩波書店〕

第Ⅹ巻　物理的運動学〔邦訳：井上健男・石橋善弘・柳下崇訳『物理的運動学』（全2巻）1982，東京図書〕

訳者紹介

好村滋洋（こうむら しげひろ） 1957年 東京大学理学部物理学科卒業
日本原子力研究所研究員
現 在 広島大学総合科学部教授
物性物理学，中性子回折専攻
理学博士

井上健男（いのうえ たけお） 1942年 東京大学理学部物理学科卒業
同大学工学研究所助手を経て
現 在 日本大学文理学部教授
原子核理論専攻
理学博士

ランダウ＝リフシッツ理論物理学教程
量子力学〔改訂新版〕2

1983年12月2日 第1刷発行 Printed in Japan
1991年1月31日 第8刷発行

検印省略

著 者 エリ・ランダウ
イェ・リフシッツ
訳 者 好村滋洋
井上健男
発行所 東京図書株式会社
〒112 東京都文京区水道 2—5—22
振替東京4-13803 電話03(3814)7818～9

ISBN 4-489-00059-6